



TITLE:

量子系における統計力学の基礎に関する数値的研究

AUTHOR(S):

齊藤, 圭司

CITATION:

齊藤, 圭司. 量子系における統計力学の基礎に関する数値的研究. 物性研究 1997, 67(4): 511-542

ISSUE DATE:

1997-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95970>

RIGHT:

量子系における統計力学の基礎に関する数値的研究

齊藤 圭司*

京都大学 人間環境学研究科

目次

1 序	512
1.1 はじめに	512
1.2 力学系	512
2 統計力学の成立の検証	
- 部分系におけるカノニカル分布の成立 -	515
2.1 はじめに	515
2.2 Energy 平均	515
2.3 部分系の温度と全系の温度	519
2.4 Energy 分布	522
2.5 まとめと議論	525
3 非平衡状態における統計力学	
— 熱伝導 —	526
3.1 はじめに	526
3.2 古典系の研究の概要	526
3.3 部分系と熱流演算子	527
3.4 量子系における熱浴	528
3.4.1 縮約密度行列に対するマスター方程式	528
3.4.2 2点関数 $h(u)$ に対する近似	530
3.4.3 数値積分について	531
3.4.4 近似の妥当性	532
3.5 熱伝導	535
3.6 まとめと議論	536
4 まとめ	537

*現在の所属 : 大阪大学理学研究科物理学専攻 宮下研究室 博士後期課程1年
E-mail address : saito@yukawa.kyoto-u.ac.jp

1 序

1.1 はじめに

この論文で我々は、平衡系と非平衡系の統計力学の基礎的な諸性質が量子力学系の純粋な時間発展の中でどのように成立していくかを数値的に調べていく。統計力学におけるアンサンブル理論の成立条件や熱伝導のフーリエの法則の成立の起源に関する問題は古くはボルツマンにまで遡る古い問題である。しかしながら、それらの成立条件は今に至るまで明確な形では与えられていない。我々の目標は、これらの諸現象を実際に示す量子力学系を具体的に見つけ、量子系においてその起源を解明するための基盤を作ることである。

具体的にこの論文では2つの問題が議論される。1つは統計力学の成立（カノニカル分布の成立）が、熱浴とみなされる力学系の大きさにどのように依存するかであり（平衡系の問題）、もう一つは系の両側に異なる温度の熱浴をつけた時に、系に現れる熱伝導の性質がもともと持つ力学系の性質にどのように影響されるかである（非平衡系の問題）。前者の問題では全系が正確に Schrödinger 方程式に従って時間発展する時、部分系に現れる統計力学的振舞いが調べられる。特に部分系におけるエネルギー分布の長時間平均がカノニカル分布とどの程度一致するか、またその一致の度合はどのように熱浴のサイズに依存していくかを詳細に調べていく。後者では、熱浴と接触する量子多体系の運動をシミュレートする方法を新たに提唱することにより数値実験を可能にし、主にフーリエの法則が現れるか否かに焦点をあて議論を進めていく。

この論文は以下のように構成される。1.2節では我々がモデルとして採用する量子スピン系について特に系の非可積分性に力点をおいて説明する。2章では、系における統計力学の成立とその成立の度合のサイズ依存性について詳細に議論する。3章ではこの論文における主要な問題となる量子系における熱伝導についての議論を展開する。そして最後に4章でまとめと簡単な議論を行なう。

1.2 力学系

我々がこの論文で用いる量子力学系の Hamiltonian は以下のように表される。

$$H = \alpha \sum_{k=1}^N \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z + \xi \sum_{k=1}^N \sigma_k^x + \gamma \sum_{k=1}^N \sigma_k^z, \quad (1)$$

ここで σ_k^z は k 番目の格子上にある スピンを表す Pauli 行列の z 成分である。 α は Ising 的な最隣接相互作用の強さを表し、 ξ, γ はそれぞれ x 方向、 z 方向の磁場の強さを表す。いま系には周期境界条件を課すものとする。本研究では Hamiltonian (1) において、 γ が 0 の場合と 0 でない場合の2種類の力学系を取り上げ、議論していく。 $\gamma = 0$ の系は可積分系と呼ばれる。これは Hamiltonian が Jordan-Wigner 変換を施すことにより次のような自由フェルミオンの形式で書けるからである [1]。

$$H_S = 2\alpha \sum_k \left\{ \left(\cos k + \frac{\xi}{\alpha} \right)^2 + \sin^2 k \right\}^{\frac{1}{2}} (b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2}), \quad (2)$$

ここで b_k は波数 k のフェルミオンの消滅演算子である。 $\gamma \neq 0$ の場合はこのように、解析的にモード展開する形で対角化をすることができないので非可積分系といわれる。このように、 γ が 0 であるか否かで系が解析的に解けるか否かの違いが現れるため、この Hamiltonian は力学的な問題を考えるのに適しているのである。この論文では一貫して、パラメータを可積分系に対しては $\alpha = 0.5, \gamma = 0.0, \xi = 1.0$ ととり、非可積分系に対しては $\alpha = 0.5, \gamma = 0.5, \xi = 1.0$ ととる。

この 2 つの系は積分可能性以外にも Energy Level Spacing spectrum にも特徴的な違いが現れる。まず始めにその Spacing spectrum の求め方を説明し、その次に実際にこの量子スピン系に対する Energy Spacing spectrum を求めてみよう。最初に状態密度を求める必要がある。

$$n_{av}(E) = \frac{1}{\Delta E} \Re(E < E_j < E + \Delta E), \quad (3)$$

ここで $\Re(E < E_j < E + \Delta E)$ は $E \sim E + \Delta E$ の値を持つ Energy 固有値の個数を表す。ここで ΔE は値をわずかに変えても状態密度があまり変わらないような小さな値をとる。次に Level Spacing を定義する。

$$S_j = n_{av} \left(\frac{E_{j-1} + E_j}{2} \right) (E_j - E_{j-1}), \quad (4)$$

これは状態密度でスケールされた最隣接 Energy Level 間の間隔である。こうして Spacing spectrum は

$$P(S) = \frac{1}{\mathcal{N}_S \Delta S} \Re\{S < S_j < S + \Delta S\}, \quad (5)$$

のように求められる。ここで \mathcal{N}_S は Spacing の全個数であり、 ΔS は ΔE と同様に $P(S)$ を変えない小さい値である。

一般的にこの spectrum は、力学系の種類によって以下に述べるようなユニバーサリティを持つことが、経験的に知られている [2, 3]。系の Hamiltonian に幾何学的な対称性があるような時、その Energy 固有値には縮退が存在する。このような場合、Spacing spectrum は次の Poisson 分布に従う。

$$P_{\text{Poisson}}(S) \cdot \Delta S = \exp(-S) \cdot \Delta S \quad (6)$$

一方相当する古典系がカオスであるあるような量子力学系では、レベル間に反発が起こり縮退は解け、Spacing spectrum は全く異なる様相を呈する。このような非可積分系は系の持つ対称性の種類により、Random Matrix 理論における直交アンサンブル (G.O.E), ユニタリー・アンサンブル (G.U.E), シンプレティック・アンサンブル (G.S.E) の持つ Spacing spectrum を持つ。これらの Spectrum は次の関数で表される。

$$P_{\text{OE}}(S) = \frac{\pi}{2} S \exp\left(-\frac{\pi}{4} S^2\right), \quad (7)$$

$$P_{\text{UE}}(S) = \frac{32}{\pi^2} S^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi} S^2\right), \quad (8)$$

$$P_{\text{SE}}(S) = \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} S^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi} S^2\right). \quad (9)$$

P_{OE} は Wigner 分布といわれ、最も多くの系で観測される spectrum である。ここで、我々が用いる量子スピン系に対して Spacing spectrum を見てみよう（同じようなスピン系に対するレベル統計の例として [4] 参照）。系のサイズを $N = 9$ とすると可積分系に対する Spectrum は Fig.1.2.1 に示されるようになり、非可積分系に対しては Fig.1.2.2 のようになる。ここで示したグラフは、平均の Spacing が 1 になるように規格化されている。

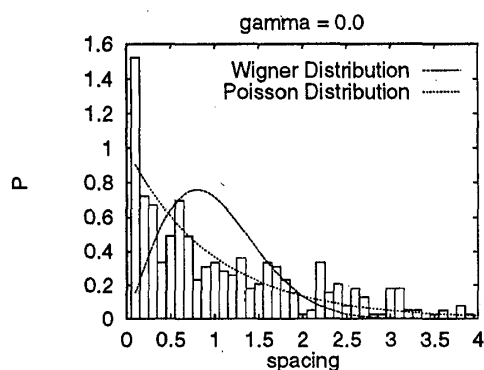


Fig.1.2.1

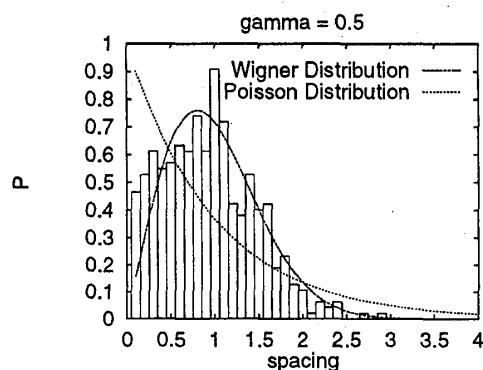


Fig.1.2.2

また、グラフ中に描かれている 2 本の曲線は、Wigner 分布 (7) と Poisson 分布 (6) を表している。これを見ると分かるように、可積分系の分布は Poisson 分布に近く、非可積分系の分布は Wigner 分布に近い。Poisson 分布は Spacing 0 で有限な値をとるのに対し、Wigner 分布では 0 の値をとるので、可積分系は非可積分系よりも縮退が多いことを示している。非可積分系ではレベル間に反発が起こり縮退が解けている。実際可積分系では、非可積分系でも保存される全エネルギーと波数以外に、フェルミオンの個数も保存しているので、そのことから縮退が多いことは予想される。また非可積分系におけるレベル間の反発を直接理解するためにレベルの γ 依存性を調べてみると、Fig.1.2.3 のような結果が得られる。これはレベルのごく一部を拡大したものであるが、たくさんのレベルの非交差が起こっていることが分かる。以上のようなことから、我々の用いる量子スピン系における非可積分系は、力学的に可積分系より複雑な運動をすることが予想される。

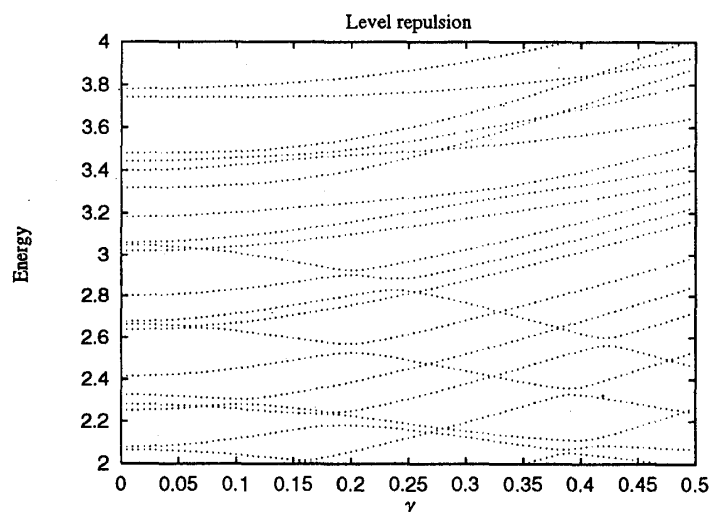


Fig.1.2.3 : レベルの γ 依存性

2 統計力学の成立の検証

- 部分系におけるカノニカル分布の成立 -

2.1 はじめに

量子力学系と統計力学の関係は未だに明確には分かっていない。伝統的に系に現れる巨視的な統計的振る舞いは、全系の大きな自由度にその起源を持つとされて来た。しかしながら古典系の場合は、少数自由度であっても系がカオスであれば運動は不規則になり、統計的な振る舞いを示すことができる。この決定論的なカオスが、古典系における統計的振る舞いの起源の有力な候補なのである [5]。一方有限自由度の量子力学系では Schrödinger 方程式が線形である以上、古典系における意味でのカオスは存在しない。それにもかかわらず Jensen と Shankar は、少数自由度量子力学系で平衡統計力学が適用できることを数値的に示した [6]。彼らは サイズ 7 の量子スピン系の孤立系で、 x 方向の全磁化の長時間平均が全体の Energy だけに依存し初期状態の詳細には依らないこと、統計力学の基本原理解である等重率の原理が成り立っていること、を数値的に観測した。さらに加えて彼らは、この性質が可積分系でも非可積分系でも同様に満たされるだろうと预言した。このように少数自由度であっても統計的振る舞いを示す力学系は存在し、実際は統計力学の起源は明確には分かっていないのである。

この章では量子系の Jensen と Shankar 等の研究を更に深めた研究をしていく [23]。我々は彼らと同じモデルを用い、特に Energy 平均と Energy 分布平均の system-size 依存性に焦点をあてることにする。まず有限自由度の全系を、概念的に 2 つの部分に分ける。1 つは部分系であり、もう 1 つは熱浴である。ここでは部分系における Energy の平均と Energy 分布を詳細に調べていく。平衡統計力学によれば、Energy の長時間平均は熱浴の状態密度から预言でき、Energy 分布の長時間平均は系のサイズ無限大の極限ではカノニカル分布になるはずである。部分系として 2 個のスピンからなるものを考え、これらの性質がどのように成り立っていくかを観測しよう。(類似の問題として [7] を参照)。その結果、我々はシミュレーションによる長時間平均と統計力学の预言値は非常によく一致し、熱浴のサイズが大きくなるほど一致の度合は増すことを見出すことができた。また可積分系と非可積分系においては、定性的な違いはなく、統計力学が非常によく成り立つことを実証することができた。

この章は以下のように構成される。まず 2.2 節では全系の Hamiltonian の説明と Energy 平均について調べる。次に 2.3 節で温度を 2 つ定義しそれを比較していく。2.4 節においては Energy 分布を求め、最後に 2.5 節で結論とその結論の妥当性について議論する。

2.2 Energy 平均

我々の用いる系は以下の Hamiltonian で記述されるサイズ N の 1 次元量子スピン系である。

$$H_T = H_S + H_R + H_{\text{int}} \quad (10)$$

$$H_S = \alpha \sigma_z(1) \sigma_z(2) + \xi \sum_{k=1}^2 \sigma_x(k) + \gamma \sum_{k=1}^2 \sigma_z(k) \quad (11)$$

$$H_R = \alpha \sum_{k=3}^{N-1} \sigma_z(k) \sigma_z(k+1) + \xi \sum_{k=3}^N \sigma_x(k) + \gamma \sum_{k=3}^N \sigma_z(k) \quad (12)$$

$$H_{\text{int}} = \lambda \{ \sigma_z(N) \sigma_z(1) + \sigma_z(2) \sigma_z(3) \} \quad (13)$$

全系の Hamiltonian H_T は第 1 章で説明した Hamiltonian とまったく同じである。 H_S と H_R と H_{int} はそれぞれ部分系、熱浴、その間の相互作用を表わす。ここで相互作用の強さである λ は α と同じ値にとる。我々は部分系を 2 個のスピンの系から成るものとして固定し、全系のスピン数 N を 6 から 12 まで変化させる。そして部分系の Energy の長時間平均と、統計力学的平均をこれから説明するような方法で求め、比較を行なう。

部分系の Energy の長時間平均 $\langle \epsilon \rangle_t$ は次のように求められる。

$$\langle \epsilon \rangle_t = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \psi^*(t) H_S \psi(t) dt \quad (14)$$

ここで $\psi(t)$ は時刻 t における全系の波動関数である。我々はこれを $N=6$ から $N=9$ に対しては数値対角化の方法で求めた。 $N=9$ 以上に対しては、コンピュータのメモリーの限界から対角化の方法が使えないため、Schrödinger 方程式 $i\partial\psi(t)/\partial t = H_T\psi(t)$ を時間幅 0.01 の 4 次の Runge-Kutta 法によるシミュレーションを行なって求めた。この 2 つの方法により求められる値が同じ値を与えることは、 N が 6 から 9 に対して確認した。

統計力学的平均は統計力学の原理に基づいて計算される。まず、Energy ϵ における熱浴の状態密度を $D(\epsilon)$ と書き、全系の Energy を E_{tot} と書く。統計力学の標準的な議論によれば、部分系が Energy ϵ_{sys} をとる確率 $P_{\text{st}}(\epsilon_{\text{sys}})$ は

$$P_{\text{st}}(\epsilon_{\text{sys}}) = c D(E_{\text{tot}} - \epsilon_{\text{sys}}) \quad (15)$$

と書ける。ここで c は規格化定数である。状態密度 $D(\epsilon)$ は Δ を適当な値にとって、 $\epsilon - \Delta$ と $\epsilon + \Delta$ の間にある H_R の固有値の数として決める。こうすることによって、本来ならデルタ関数の和と表わされる針山状の状態密度を、粗視化をして滑らかな関数にする。 Δ は $N=6$ から $N=9$ に対しては 2.0、 $N=10$ と $N=12$ に対しては 1.5 ととった。このように選ぶことで Δ の値を少しぐらい変化させても、 $D(\epsilon)$ の値にはほとんど変化を与えないようにすることができる。

部分系の Energy 固有値の数は 4 つあるが、それらのうち i 番目の固有値を $\epsilon_{\text{sys}}(i)$ と書く。このとき部分系の統計力学的 Energy 平均は、

$$\langle \epsilon \rangle_{\text{st}} = \sum_i^4 \epsilon_{\text{sys}}(i) P_{\text{st}}(\epsilon_{\text{sys}}(i)). \quad (16)$$

と書ける。ここで我々は熱浴と部分系の相互作用の H_{int} の効果を見逃していることに注意しなければならない。しかしながら、相互作用は部分系と熱浴の Energy に比べ小さいのでこの効果は無視できる。

以上のように長時間平均 $\langle \epsilon \rangle_t$ と統計力学的平均 $\langle \epsilon \rangle_{\text{st}}$ が求まるので、それらの値を可積分系と非可積分系において比べてみることにする。両方の系において、サイズ N ごとに次のよ

うにガウス分布から初期状態を決める。 i 番目の基底に対する係数を c_i とする。その時 c_i がとる値の確率 $P(c_i)$ はガウス分布によって、

$$|\psi(0)\rangle = \sum c_i |i\rangle \quad P(c_i) = \sqrt{\pi D} \exp\{-c_i^2/D\}, \quad (17)$$

で与えられるものとする。ここで $|i\rangle$ は i 番目の全系の基底である。このようにして初期条件を決めると、初期状態の係数の分布はいかなるユニタリ変換の下でも不変になる。このようにして 30 個の初期条件をとり、それらに対し 2 つの値を比較する。この各々の初期条件に対する $\langle \epsilon \rangle_t, \langle \epsilon \rangle_{st}$ をプロットすると、非可積分系に対しては Fig.2.2.1 のようになり、可積分系に対しては Fig.2.2.2 のようになる。これらの図で 1 つ 1 つの点がそれぞれの初期条件から得られた長時間平均と統計力学的平均を表す。

Fig.2.2.1 : 非可積分系に対してさまざまな全系のサイズで得られる部分系の長時間平均と統計力学的平均 (a) : $N = 6$, (b) : $N = 8$, (c) : $N = 10$, (d) : $N = 12$

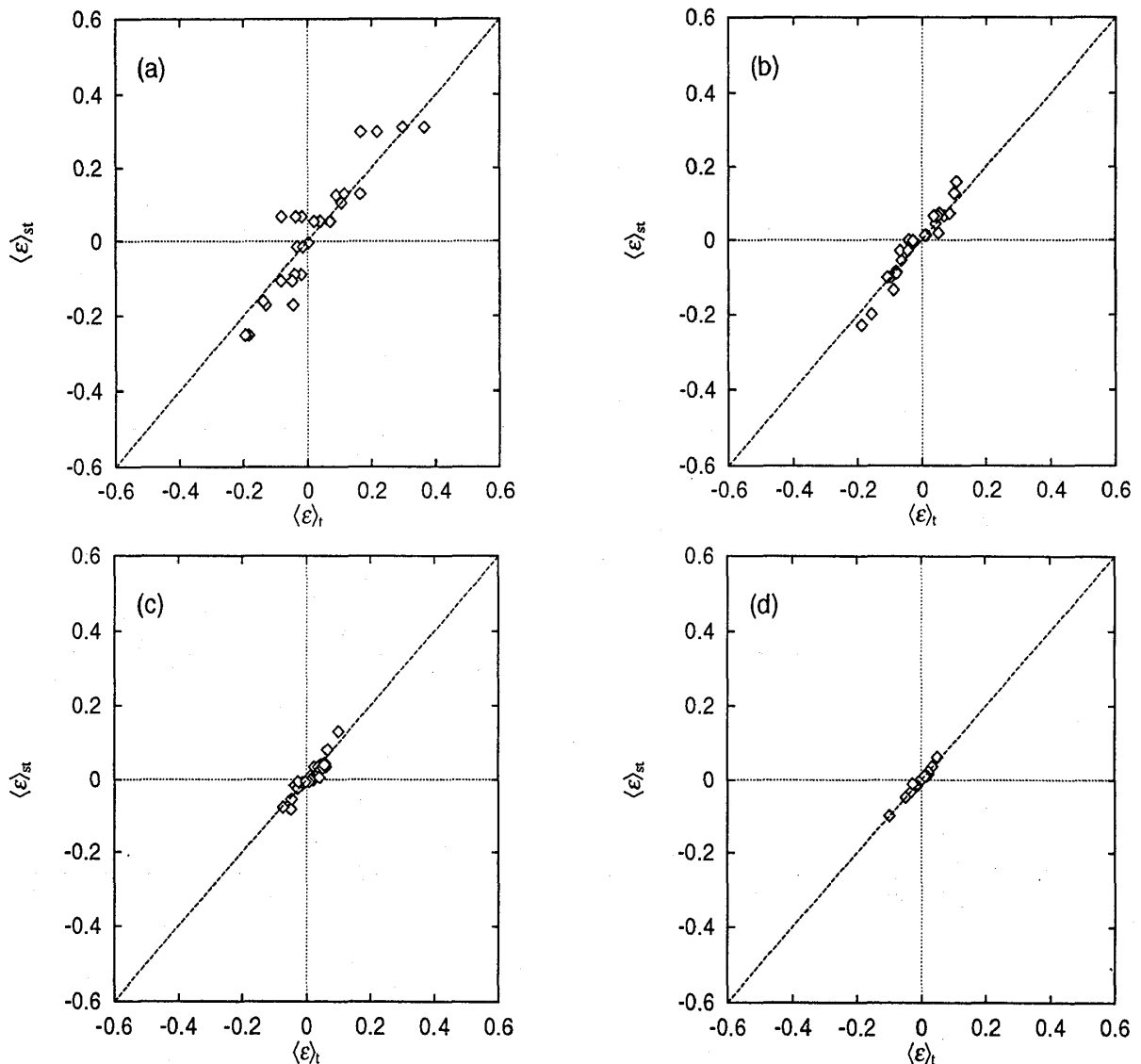
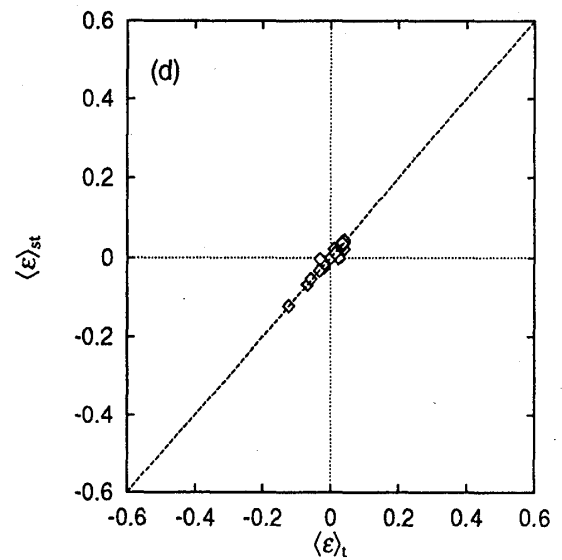
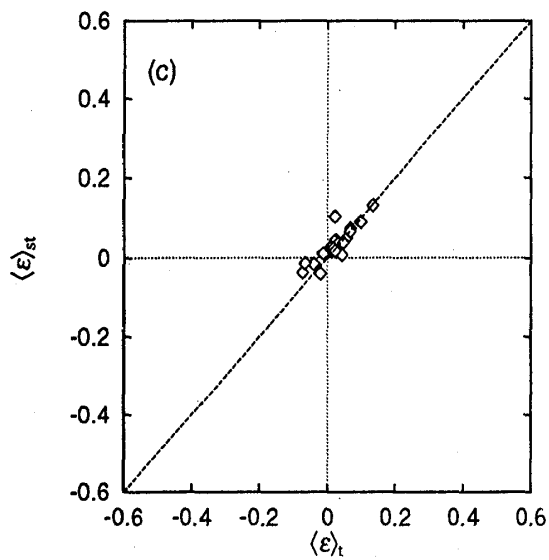
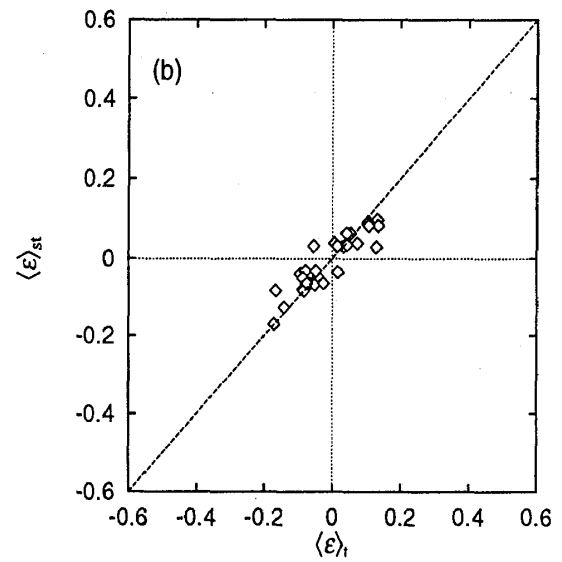
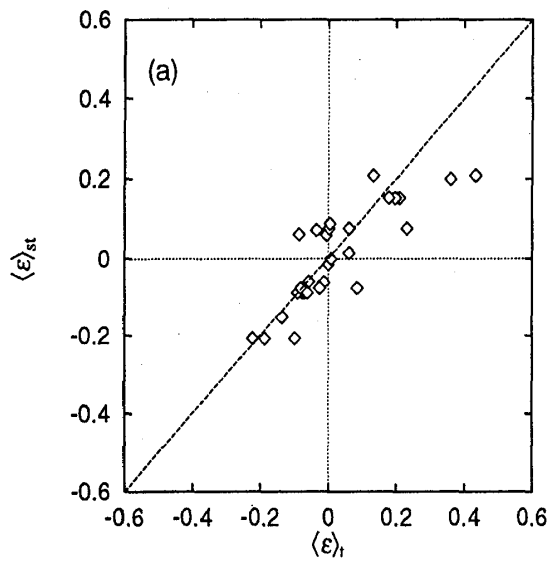


Fig.2.2.2 : 可積分系に対してさまざまな全系のサイズで得られる部分系の長時間平均と統計力学的平均 (a) : $N = 6$, (b) : $N = 8$, (c) : $N = 10$, (d) : $N = 12$



2つの値 ($\langle \epsilon \rangle_t, \langle \epsilon \rangle_{st}$) のずれを見積もるために ($\langle \epsilon \rangle_t - \langle \epsilon \rangle_{st}$) の分散をみてみよう。この方法で測ったずれのサイズ依存は Fig.2.2.3 に示される。

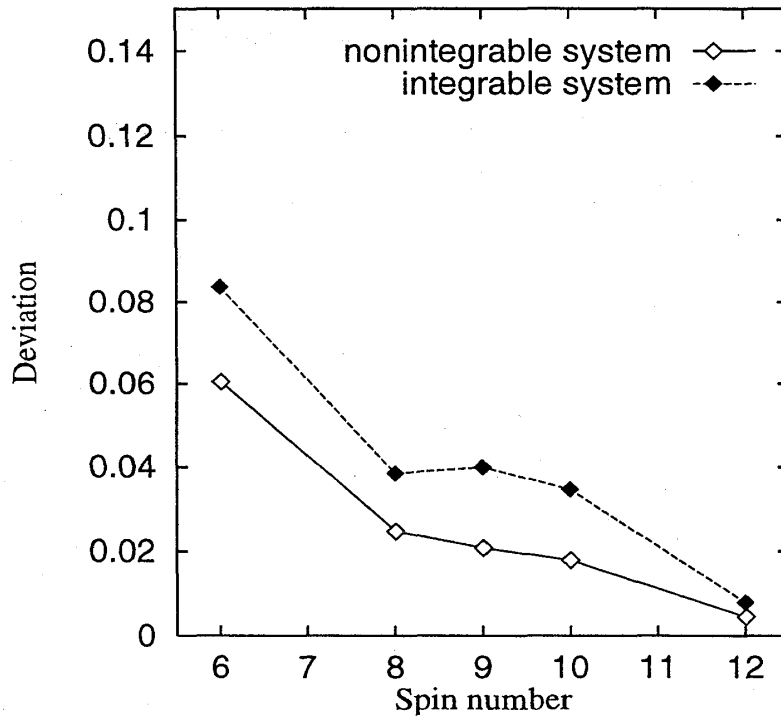


Fig.2.2.3 : ずれのシステム・サイズ依存性

このように長時間平均と統計力学的平均はサイズが大きくなっていくにつれ、より一致していくことが分かる。可積分系では非可積分系より大きなずれが観測されるが、サイズ依存性に関する限り定性的な違いは見られず、 $N = 12$ ではほぼ両者のずれの度合は一致してしまう。これは、Jensen 等の結果を支持する結果である。我々の初期状態の決め方は Energy に対してでなく位相空間において、ランダムにとるという取り方をしたので当然のこととしてそれは高温付近、つまり Energy 0 付近に相当するものが多くなっている。また初期条件をランダムにとったことから、系の保存量の固有状態を選ぶ可能性があるが、これらの図をみる限り、サイズが大きければ保存量はほとんど影響していないことが分かる。さらにサイズが小さい時でも、2種類の平均はよく一致していることが分かる。また傾向が突然変わるようなサイズの境界値のようなものは観測されなかった。

2.3 部分系の温度と全系の温度

次に2種類の温度 β_{sys} と β_{tot} を定義してそれらを比較する。 β_{sys} は平衡状態における部分系の温度の Energy 依存性から求める。式で示すと、

$$\begin{aligned} \beta_{\text{sys}} &= f^{-1}(\langle \epsilon \rangle_t) \\ f(\beta) &\equiv \sum_{i=1}^4 \frac{\exp(-\beta E_{\text{sys}}(i)) E_{\text{sys}}(i)}{Z_s} \end{aligned} \quad (18)$$

である。 β_{tot} は平衡状態における系の温度の Energy 依存性から求める。即ち、

$$\begin{aligned}\beta_{\text{tot}} &= g^{-1}(E_{\text{total}}) \\ g(\beta) &\equiv \sum_{i=1}^{2^N} \frac{\exp(-\beta E_T(i)) E_T(i)}{Z_t}\end{aligned}\quad (19)$$

である。ここで、 $E_T(i)$ は H_T の i 番目の固有値である。こうして得られる温度を様々な初期状態に対して求め、Fig.2.3.1 と Fig.2.3.2 に示す。横軸は β_{sys} であり縦軸は β_{tot} である。これらも先程の Energy の平均値と同じ様に両者は一致する傾向があり、大きなサイズでは力学系によらないことが分かる。

Fig.2.3.1 : 非可積分系に対してさまざまな全系のサイズで得られる 2 つの温度 β_{sys} と β_{tot} (a) : $N = 6$, (b) : $N = 8$, (c) : $N = 10$, (d) : $N = 12$

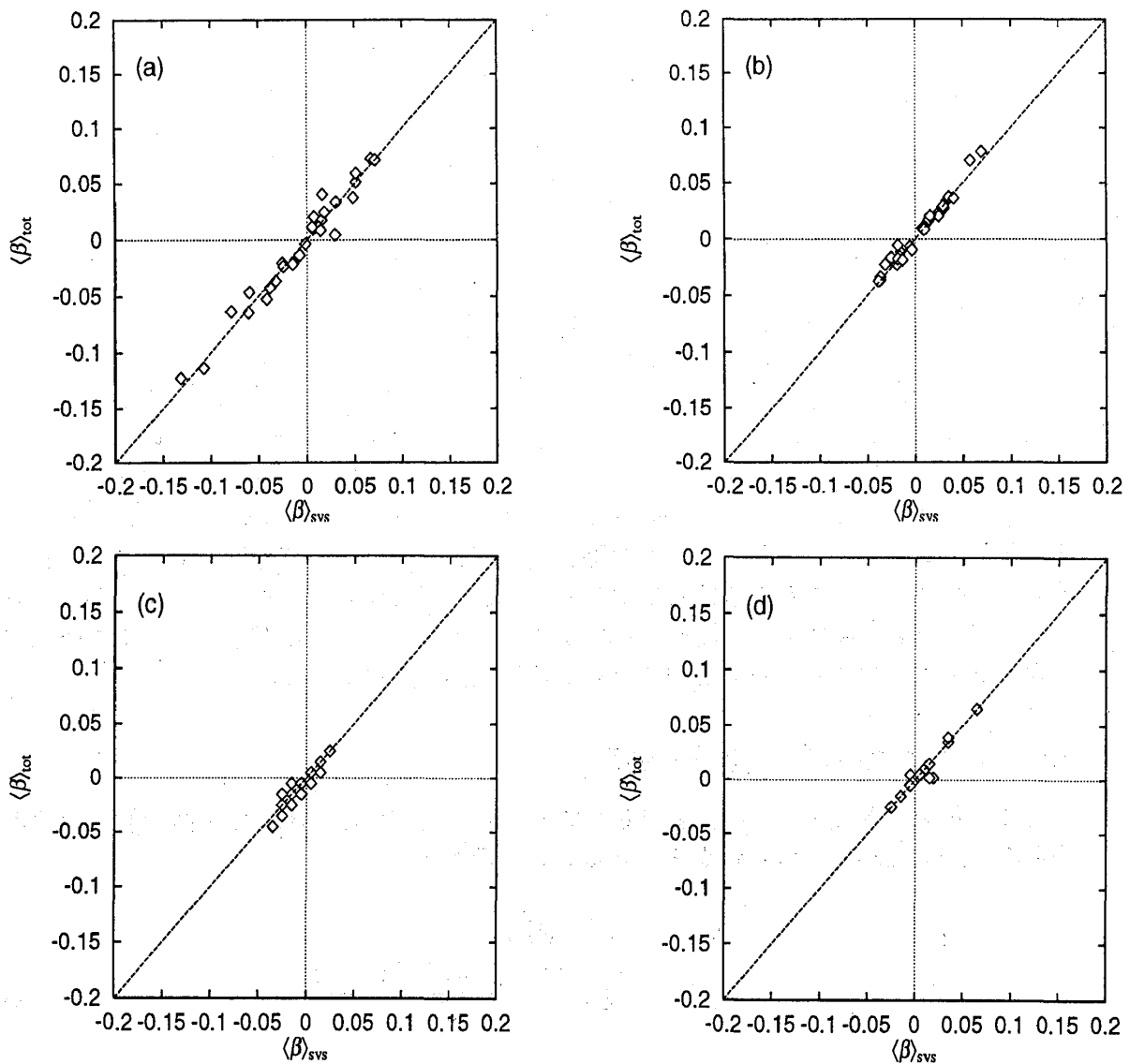
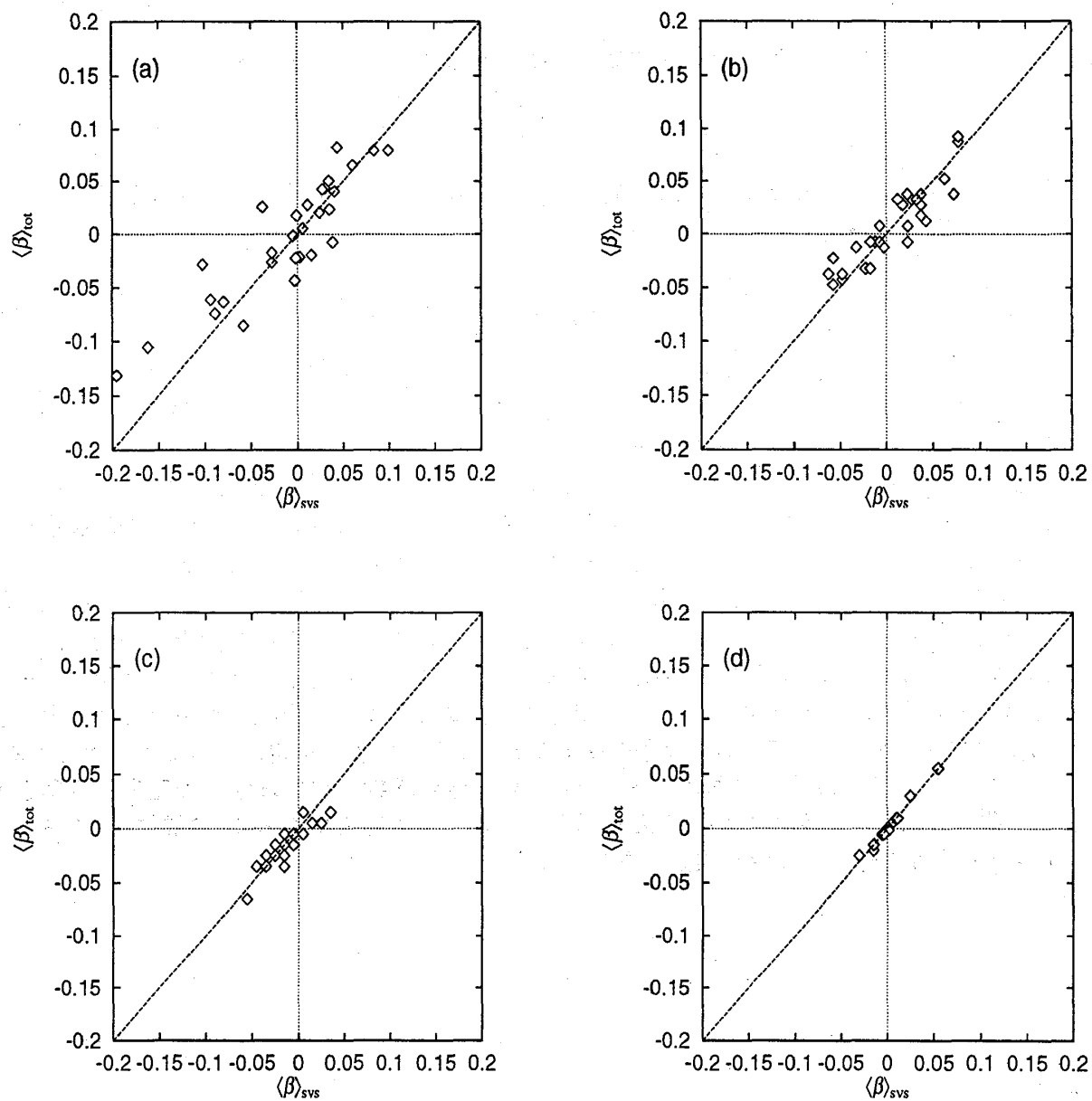


Fig.2.3.2 : 可積分系に対してさまざまな全系のサイズで得られる2つの温度 β_{sys} と β_{tot}
 (a) : $N = 6$, (b) : $N = 8$, (c) : $N = 10$, (d) : $N = 12$



2.4 Energy 分布

部分系における Energy 分布を求めてみる。量子統計力学によれば部分系の固有状態に対する Energy 分布はカノニカル分布を形成する。そのことを確かめるために、我々はここで 3 種類の Energy 分布を定義しそれらを比較する。 $|E_{\text{sys}}(i)\rangle$ を部分系における i 番目の固有 Energy $E_{\text{sys}}(i)$ に対する固有状態とする。まず次のように (18) で得られる 逆温度 β_{sys} に対するカノニカル分布を求める。

$$P_c(i) = \frac{\exp(-\beta_{\text{sys}} E_{\text{sys}}(i))}{Z_s}. \quad (20)$$

次に 2.2 節で説明した熱浴の状態密度から得られる統計力学的分布 P_{st} を求める。

$$P_{\text{st}}(i) = cD(E_{\text{total}} - E_{\text{sys}}(i)). \quad (21)$$

最後に全系が Schrödinger 方程式に従って時間発展していくときに、実際に部分系の固有状態が実現する確率

$$P_t(i) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\langle E_{\text{sys}}(i) | \psi(t) \rangle|^2 dt, \quad (22)$$

を求める。ここで $\psi(t)$ は全系の波動関数であり、 2^N 個の基底を持つ。また、 $|E_{\text{sys}}(i)\rangle$ は部分系の 4 つの基底を持つ。したがって $\langle E_{\text{sys}}(i) | \psi(t) \rangle$ は熱浴の 2^{N-2} 個の基底を持つ縮約波動関数を表わしていることになる。

2.2 節でも言及したが、(17) で得られるほとんどの初期条件の Energy は高温領域 $\varepsilon \sim 0$ となってしまう。したがって、ほとんどの初期条件に対する Energy 分布は flat な分布となってしまう。実際、我々はこれらの初期条件に対する (P_c , P_t , P_{st}) の分布が flat になっていて、これらの分布がほぼ一致していることを観測した。ここでは、低温領域の Energy 分布を示してみる。各サイズ、各力学系における典型的な分布を Fig.2.4.1 と Fig.2.4.2 に示した。これをみる限り $N=6$ のような小さな熱浴の時でさえ 3 種類の分布は良い一致を見せていることが分かるであろう。この図より、今我々が用いている少数自由度力学系において、Energy 分布をみることにより '温度' を定義できることが分かる。これまでの節では部分系における Energy の期待値が統計力学における等重率の原理を用いて得られる値と一致していることを示してきた。この節ではさらに、統計力学における Energy 分布に対する仮説を検証したことになる。

Fig.2.4.1 : 非可積分系に対してさまざまな全系のサイズで得られる 3 種類の分布 (20) –
 (22) (a) : $N = 6$, (b) : $N = 8$, (c) : $N = 10$, (d) : $N = 12$

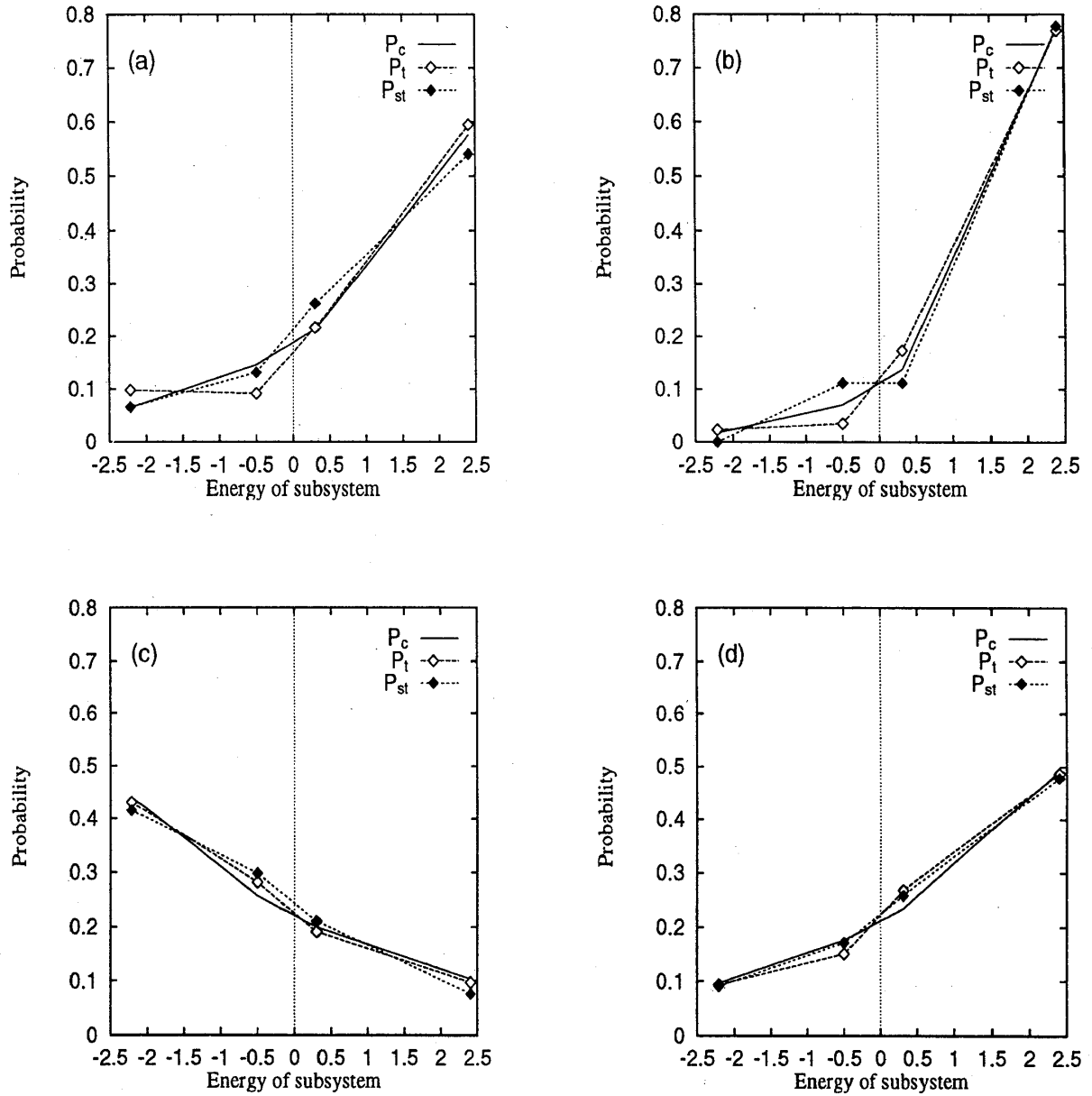
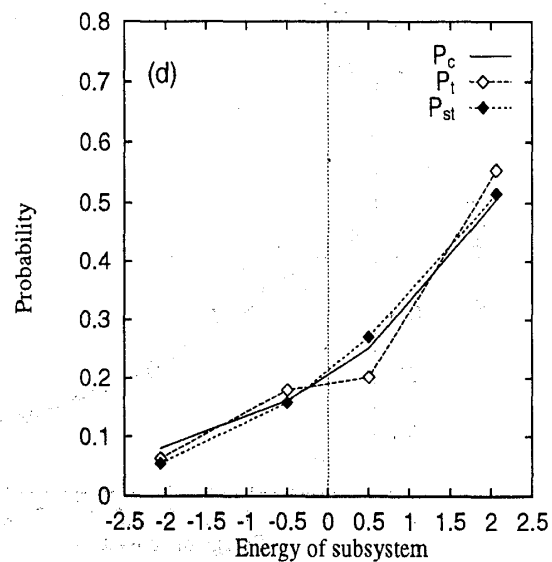
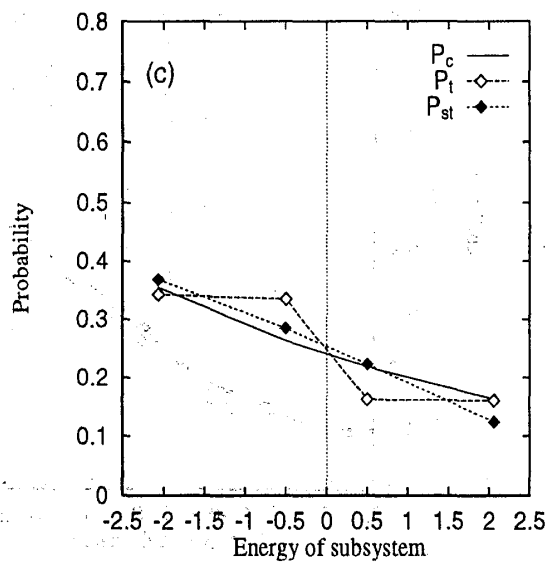
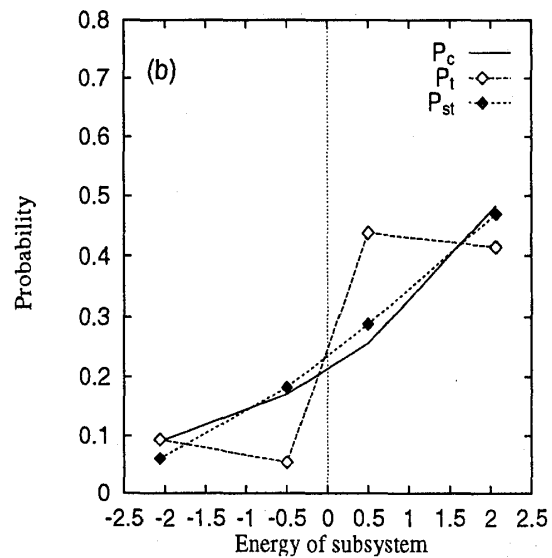
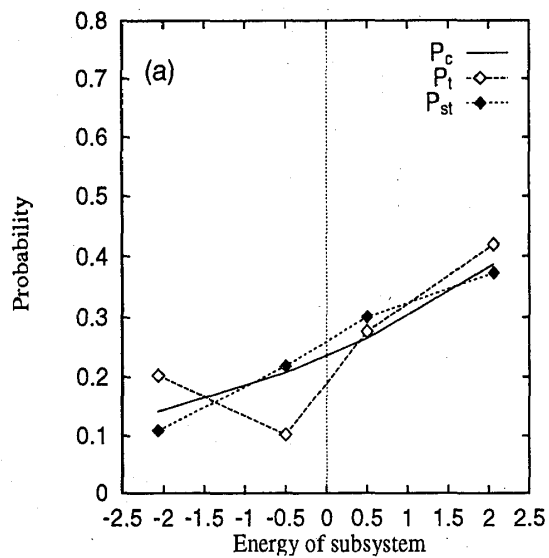


Fig.2.4.2 : 可積分系に対してさまざまな全系のサイズで得られる 3 種類の分布 (20)–(22)
 (a) : $N = 6$, (b) : $N = 8$, (c) : $N = 10$, (d) : $N = 12$



2.5 まとめと議論

我々は、小さい系でも統計力学が成り立っていることを検証した。2.2節では2つの方法(14)と(16)で得られるEnergyの平均値を比べ、この系でエルゴード性が満たされている(時間平均とアンサンブル平均が一致する)ことを支持する結果を得た。2.3節では2種類の温度を定義し、それらが一致することを示した。そして2.4節では、2種類のEnergy分布 P_{st} と P_t がカノニカル分布 P_c にほぼ一致していることをみた。このことから、我々はHamiltonian(10)–(13)で表わされる量子力学系がJensenとShankar等の議論よりもっと本質的な意味で統計力学を成立させていることを示すことができた。つまり、サイズの大きな $N=12$ のような系では等重率の原理が成り立っているだけでなくEnergy分布から温度を定義することができるのである。

この系でカノニカル分布が成立することを確証するため(10)–(13)を修正したHamiltonianを作り前節まで行ってきたことと同じことを行なってみた。ここでは部分系は3つのスピンから成り、それら各々がすべて熱浴に接触している。パラメータは(10)–(13)における非可積分系の場合の値が用いられる。

$$\begin{aligned} H_S &= \alpha \sum_{i=1}^2 \sigma_z(i) \sigma_z(i+1) + \xi \sum_{i=1}^3 \sigma_x(i) \\ H_R &= \alpha \sum_{k=4}^7 \sigma_z(k) \sigma_z(k+1) + \xi \sum_{k=4}^7 \sigma_x(k) + \gamma \sum_{k=4}^7 \sigma_z(k) \quad (\text{周期境界条件}) \\ H_{int} &= \lambda \{ \sigma_z(1) \sigma_z(7) + \sigma_z(2) \sigma_z(5) + \sigma_z(3) \sigma_z(4) \} \end{aligned}$$

この新しい系でも前節までみた結果と定性的には同じ結果を得た。更に、前節までみてきた量子スピン系は反強磁性体の系であったが、強磁性体の場合も調べてみた。その結果、この場合も定性的に同じ結果を得た。このようにして我々が用いた力学系は、幾何学的な構造を変えても統計力学を非常に良く成立させることが分かり、我々が前節まで見てきたことが、力学系をたまたま特殊な幾何学的構造にとったからではないということが示されたのである。

3 非平衡状態における統計力学

— 熱伝導 —

3.1 はじめに

熱伝導における Fourier の法則がどのような力学系で成立するかという問題はこれまで数多くの研究がなされてきた。しかしながら、未だにこの問題に対する明確な答えは得られていない。Fourier の法則の解析的な導出は、Lorentz gas に対する Boltzmann-grad 極限というのがあるのみで、主にこの問題に対する研究は数値計算によるものである [8]。この理由は、Fourier の法則は系が十分に chaotic なときに成り立つものなので、摂動的な解析では対処できないからである。またその数値計算も、例えば格子間が非線形なバネでつながれた Fermi-Pasta-Ulam 型の連成振動子 (FPU 格子) [9] や、セル・オートマトン [10] など古典系の研究しかされず、量子系においてはこのような研究はない。その理由は量子系では熱浴を付けるのに大きな困難があるからである。古典系の場合の熱浴は、熱浴の時間スケールが系の時間スケールより十分小さいということから、速度分布が Maxwell 分布であるようなノイズ (Langevin force) として表現することができ、それは数値計算でも簡単に実現することができた。しかしながら量子系の場合は事情が異なる。量子系は、演算子の非可換性があるために、系と熱浴を完全に分割することはできない。したがって量子系においては、熱浴を系と独立に運動する対象ととらえる Langevin force を用いても系が平衡に達するかどうかは自明ではない。量子系における系の時間発展は、まず系を全系 (熱浴と系) の構成要素の一部としてとらえ、全系の運動から射影して得なければならない。しかしながら、実際はそのようにして系の時間発展方程式が得られても、多体系に対してそれを正確に数値的に解くことは、コンピューターのメモリー的にも計算能力的にも事実上不可能である [25]。このような事情から、量子系における熱伝導の本質的な研究はまったくされてこなかった。(しかし Langevin force 的アプローチによって完全調和格子の熱伝導を研究したものは存在する [12])

我々はこの章でも第 1 章で導入した力学系を用いるが、熱伝導を考えるのでここではその周期境界条件をはずしたものを使う。そして数値的に熱浴を付ける方法を提唱し、その方法を使って系に異なる温度の熱浴を付け、 γ が 0 である可積分系と 0 でない非可積分系における最終定常状態の温度の空間分布をみていく。その結果我々は、可積分系では温度分布は flat になってしまうが、非可積分系では有限な温度勾配が現れることを見出した。この章は以下のように構成されている。3.2 節では我々の研究との比較の上で重要なこれまでの古典系の研究についてまとめる。3.3 節では部分系の定義と、熱流演算子の導出をする。3.4 節では最も重要な熱浴の問題について詳細に説明し、3.5 節ではその方法を使ったシミュレーションの結果をまとめる。そして最後に 3.6 節でまとめと、簡単な議論をする。

3.2 古典系の研究の概要

古典系において最も研究されてきた力学系は、連成振動子系である。その中で特に、格子間が Hooke の法則に従うバネでつながれた連成振動子系を完全調和格子、非線形なバネ

でつながれたものを FPU 格子という。完全調和格子の最も顕著な特徴は、定常状態におけるすべての格子の温度が、両側の熱浴の温度のちょうど中間の温度に収束してしまつて、温度分布が flat になってしまうことである。更に熱流は熱浴の温度を格子数で割った‘勾配’でなく、単なる‘熱浴の温度差’に比例する。その結果熱伝導係数が発散するという異常なことが起きる [14, 15, 16]。完全調和格子の Hamiltonian は作用変数 J_k と、角変数 ω_k を用いると $H = \sum_k \omega_k J_k$ と表せる。このことからこれらの結果は、波数 k をもった粒子が、他の粒子と衝突なしに自由に飛び回っているという物理的なイメージを持つと、自然な結果であることが分かる。

次に FPU 格子に対しては数値的な計算によって、次のようなことが分かっている。つまり、Fourier の法則の実現のためには系の非線形パラメータを大きくとり非可積分性を大きくすることが必要であるということ、熱浴と系との接触点である系の両端において大きな温度のとびができるということ、そしてその結果系の温度領域は狭くなってしまう、ということである。しかし Fourier の法則の実現に非可積分性が必要であると言っても、非可積分性が満たされ十分に chaotic な系でどのようなメカニズムで Fourier の法則が成り立っていくのかは、全く分かっていない。その意味では古典系ですら熱伝導の問題は、平衡系の統計力学の起源同様なにも分かっていないのである。その他にも、Green-Kubo 公式が成立するかといった問題も活発に議論されているが、今の我々の量子系の研究ではこの公式に対する議論ができる段階ではないので、3.6 節の議論で言及するにとどめたいと思う。

3.3 部分系と熱流演算子

我々の考える全系の Hamiltonian H_T は、注目する系の Hamiltonian H_S と熱浴の Hamiltonian H_R と相互作用の Hamiltonian H_{Int} から構成される。

$$H_T = H_S + H_R + \lambda H_{Int} \quad (23)$$

$$H_S = \alpha \sum_{k=1}^{N-1} \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z + \sum_{k=1}^N \sigma_k^x + \gamma \sum_{k=1}^N \sigma_k^z \quad (24)$$

$$H_{Int} = \sigma_1^z \sigma_1^z + \sigma_N^z \sigma_N^z. \quad (25)$$

ここで H_S は第 1 章で導入した Hamiltonian である。 σ_1^z と σ_N^z はそれぞれ系の 1 番目と N 番目の格子に接触している熱浴の演算子である。 λ は熱浴と系の相互作用の強さである。ここで熱浴の Hamiltonian は与えていないが、具体的な力学系を指定せずその代わりに後で熱浴の 2 点関数を論じる。

熱伝導の実験では温度の空間分布を求める必要がある。そのためには、系の中でローカルな場所を決める部分系を定義する必要がある。まず簡単のために演算子 \hat{a} を

$$\begin{aligned} \hat{a}(2i-1) &\equiv \xi \sigma_i^x + \gamma \sigma_i^z & \text{for } 1 \leq i \leq N \\ \hat{a}(2i) &\equiv \alpha \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z & \text{for } 1 \leq i \leq N-1 \end{aligned}$$

と定義する。そして i 番目の部分系 $H_{ss}(i)$ を i 番目と $(i+1)$ 番目のスピンを用いて

$$H_{ss}(i) = \hat{a}(2i-1) + \hat{a}(2i) + \hat{a}(2i+1) \quad (26)$$

と定義しよう。このようにして得られた i 番目の部分系は i 番目のスピンと $(i+1)$ 番目のスピンで成り立っているため、スピンの数が N ならば部分系の数は $N-1$ になることに注意しなければならない。全体の概念図を示すと、次の Fig3.3.1 のようなものになる。

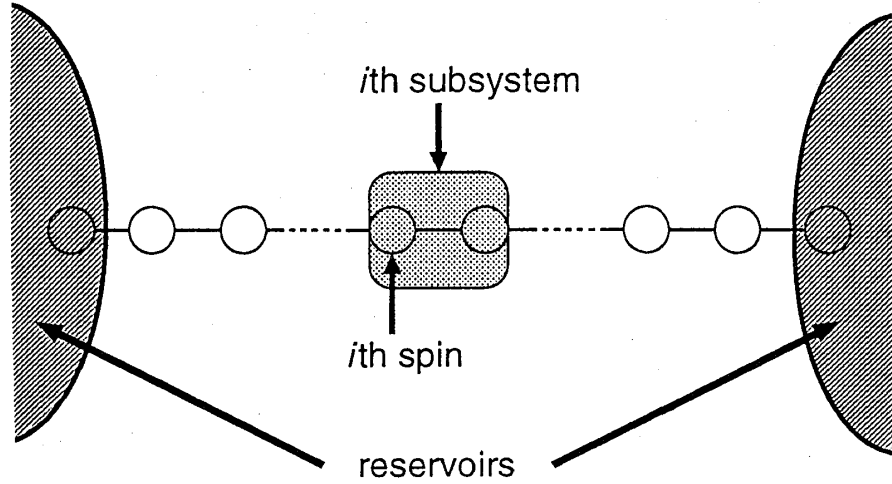


Fig.3.3.1

このように部分系を定義すると i 番目の部分系における熱流演算子は次のように 2 つ定義できる。つまり、 i 番目の部分系の左側の格子における熱流演算子 $\hat{j}_L(i)$ と、右側の格子における格子の熱流演算子 $\hat{j}_R(i)$ である。それらはそれぞれ、

$$\hat{j}_L(i) = -i [\hat{a}(2i-1), \hat{a}(2i-2)], \quad (27)$$

$$\hat{j}_R(i) = -i [\hat{a}(2i+2), \hat{a}(2i+1)], \quad (28)$$

と表される。これらの演算子を用いると Energy に関する連続の式

$$\frac{\partial H_{ss}(i,t)}{\partial t} = -\hat{j}_R(i) + \hat{j}_L(i),$$

が得られる。ここで $H_{ss}(i,t)$ は $H_{ss}(i)$ のハイゼンベルク表現である。

3.4 量子系における熱浴

3.4.1 縮約密度行列に対するマスター方程式

熱浴という外部環境におかれている量子系の性質を調べる研究は、近年盛んに議論されてきている。特にキャビティー内にある原子からの光の輻射の問題や、磁氣的トンネル現象、スピン緩和の問題などがそれらの典型的な例である。それらの問題は、各々で違った表現で熱浴の効果を記述し研究されている。例えば光輻射やスピン緩和の問題では、主に射影演算子方法によって外界の影響を注目する系に取り入れ、系の時間発展方程式を得る [20, 21]。一方、磁氣的トンネル現象や化学物理の諸問題で採用されている手法は、外界の

影響を取り入れた系の密度行列を経路積分で記述し、最後に Most Probable Path をとって系の運動方程式を導出する Feynman-Vernon の影響汎関数法である [17]。とくにこの手法を使って量子摩擦の方程式を導出し、熱的なトンネル現象を議論した Caldeira-Leggett の方法は非常に有名である [18, 19]。

3.1 節でも触れたが、古典系の場合の熱浴は熱的なノイズでよかった。その理由は、熱浴の時間スケールが系の時間スケールよりも十分に短かく、系にとって熱浴の運動がストキャスティックにみえるはずだという物理的な要請があるからである。しかしながら、量子系の場合はそのような直観によって熱浴をつけてはいけない。量子系では系と熱浴の演算子は非可換である。そのため、熱浴を系と独立に運動する対象として見ることはできない。この非可換性がすべての量子系の問題を厄介なものとしているのである。それではどうするかというと、熱浴と系をあわせた全系の時間発展をまず考え、それから熱浴の自由度を消去し熱浴の効果を取り入れた系の時間発展を取り出すということを行なう。こうすると系の時間発展は必然的に非マルコフ的になる。この事は次のような考察で容易に分かる。ある時刻で系が熱浴と接触し、熱浴に影響を与えたとする。すると今度は次の微小時間後に、系から影響を受けた熱浴が系に影響を与えることになる。系の時間発展は、系の過去に影響されるので非マルコフ的になるのである。

我々の問題で、射影演算子の方法を採用し、両側に熱浴を付けた状態の系の方程式を導くことにする。系の時間発展方程式は、系の密度行列 $\rho(t)$ に対して導出される。射影演算子法によって、 $\rho(t)$ に関するマスター方程式は相互作用の強さ λ に関するベキで展開され次のように表わすことができる [22] (導出は Appendix A を見よ)。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = & -i \left[H_S + \lambda \sum_{k=1 \text{ and } N} \langle \sigma_k^z \rangle_k \sigma_k^z, \rho(t) \right] \\
& + \lambda^2 \sum_{k=1 \text{ and } N} [\sigma_k^z, \{ \int_0^t du \langle \Delta \sigma_k^z \Delta \sigma_k^z(u) \rangle_k e^{-iH_S u} \rho(t-u) \sigma_k^z e^{iH_S u} \\
& \quad - \sum_{k=1 \text{ and } N} \int_0^t du \langle \Delta \sigma_k^z \Delta \sigma_k^z(-u) \rangle_k e^{-iH_S u} \sigma_k^z \rho(t-u) e^{iH_S u} \}] \\
& + \lambda^3 \sum_{k=1 \text{ and } N} [\sigma_k^z, \int_0^t dv \int_0^v du \langle \Delta \sigma_k^z \sigma_k^z(-u) \Delta \sigma_k^z(-v) \rangle_k e^{-iH_S u} \sigma_k^z e^{iH_S(u-v)} \sigma_k^z \rho(t-v) e^{iH_S v} \\
& \quad - \sum_{k=1 \text{ and } N} \int_0^t dv \int_0^v du \langle \sigma_k^z(-u) \Delta \sigma_k^z \Delta \sigma_k^z(-v) \rangle_k e^{-iH_S v} \sigma_k^z \rho(t-v) e^{iH_S(v-u)} \sigma_k^z e^{iH_S u} \\
& \quad - \sum_{k=1 \text{ and } N} \int_0^t dv \int_0^v du \langle \Delta \sigma_k^z(-v) \Delta \sigma_k^z \sigma_k^z(-u) \rangle_k e^{iH_S v} \sigma_k^z e^{iH_S(u-v)} \rho(t-v) \sigma_k^z e^{iH_S v} \\
& \quad + \sum_{k=1 \text{ and } N} \int_0^t dv \int_0^v du \langle \Delta \sigma_k^z(-v) \sigma_k^z(-u) \Delta \sigma_k^z \rangle_k e^{-iH_S v} \rho(t-v) \sigma_k^z e^{iH_S(v-u)} \sigma_k^z e^{iH_S u}] \\
& + O(\lambda^4),
\end{aligned} \tag{29}$$

ここで

$$\langle \dots \rangle_k = \frac{\text{Tr} \{ \dots e^{-\beta_k H_R} \}}{\text{Tr} \{ e^{-\beta_k H_R} \}},$$

$$\begin{aligned}\sigma_k^z(t) &= e^{iH_R t} \sigma_k^z e^{-iH_R t} \\ \Delta\sigma_k^z &= \sigma_k^z - \langle \sigma_k^z \rangle_k \quad k = 1, N\end{aligned}$$

ここで β_k は系の k ($k = 1$ or N) 番目のスピンと相互作用している熱浴の逆温度で、詳しく書くと、 $\beta_1 = \frac{1}{k_B T_1}$, $\beta_N = \frac{1}{k_B T_N}$ となる。

一般に $O(\lambda^n)$ には、熱浴の n 点関数が現れることに注意しよう。物理的な観点では n 次の項は、ある時刻での系と熱浴との n 回の相互作用のやり取りと解釈することができるだろう。今、ここで熱浴と系の相互作用が十分に小さい ($\lambda \ll 1$) 時を考えよう。この時、高次の項は無視できるから、最初の散逸項である 2 次までをとることで $\rho(t)$ の時間発展を近似すると、 $\rho(t)$ のマスター方程式は以下のように整理される。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= -i[H_S, \rho(t)] \\ &\quad -i\lambda \left\{ \langle \sigma_1^z \rangle_1 [\sigma_1^z, \rho(t)] + \langle \sigma_N^z \rangle_N [\sigma_N^z, \rho(t)] \right\} \\ &\quad + \lambda^2 \left\{ [\sigma_1^z, f_1(t) - f_1^\dagger(t)] + [\sigma_N^z, f_N(t) - f_N^\dagger(t)] \right\},\end{aligned}\quad (30)$$

$$\begin{aligned}f_k(t) &= \int_0^t du h_k(u) e^{-iH_S u} \rho(t-u) \sigma_k^z e^{iH_S u}, \\ h_k(u) &= \langle \Delta\sigma_k^z \Delta\sigma_k^z(u) \rangle_k, \\ \langle \dots \rangle_k &= \frac{\text{Tr} \{ \dots e^{-\beta_k H_R} \}}{\text{Tr} \{ e^{-\beta_k H_R} \}}, \\ \Delta\sigma_k^z &= \sigma_k^z - \langle \sigma_k^z \rangle_k, \\ \Delta\sigma_k^z(u) &= e^{iH_R u} \Delta\sigma_k^z e^{-iH_R u} \quad k = 1, N.\end{aligned}$$

ここで得られた方程式は非マルコフの方程式である。このタイプのマスター方程式を Time Convolution (TC) 方程式という。この方程式を式変形してマルコフ方程式にしたものは Time convolutionless (TCL) 方程式といい、さまざまな分野で研究されている。この TC 型、TCL 型の詳しい説明は Appendix B にまわす。

3.4.2 2 点関数 $h(u)$ に対する近似

この節では方程式 (30) に現れる 2 点関数 $h(u)$ に対する近似関数を導入する。熱浴の情報はすべてこの 2 点関数に含まれている。そこで我々は熱浴の Hamiltonian を与えるのではなくこの 2 点関数を与えることで熱浴を表現することにする。次のような関数形を仮定しよう。

$$h(u) = h(0) \cdot \exp \left(-\frac{|u|}{\tau} + i\omega_0 u \right) \quad (31)$$

3.4.3 節で説明するように、この関数を導入すると方程式 (30) は数値積分が可能になるという大きなメリットがある。またこの関数は、現実的にもっともらしい関数でもある。そ

のことは次のような Hamiltonian で表される熱浴の力学系を考え、実際に 2 点関数を計算し、それと近似関数 (31) を比較すると分かる。

$$H_R = \alpha \sum_{k=1}^N \sigma_z(k) \sigma_z(k+1) + \xi \sum_{k=1}^N \sigma_x(k) + \gamma \sum_{k=1}^N \sigma_z(k) \quad (\text{周期境界条件}). \quad (32)$$

Fig.3.4.1 で示したものが、この力学系に対する 2 点関数の結果である。図において白い点を実数部分の値を示し、黒い点は虚数部分の値を示す。実線はこれらの点に対し (31) によって fitting をした線である。このグラフを見ると、形状としては振動しながら緩和するという近似が自然であることが分かる。

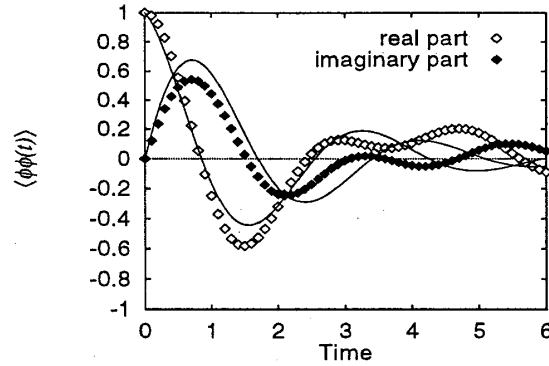


Fig.3.4.1 : 熱浴 (32) に対する 2 点関数 $h(u)$ ($N = 8, \phi = \sigma_z(1), \beta = 0.825$)

我々は近似関数の (τ, ω_0) が熱浴の力学系をある程度決め、温度も決めるという解釈をする立場をとる。温度は、最終状態の系の Energy 分布から逆算する。

3.4.3 数値積分について

この節では、2 点関数として (31) を採用すると、 $\rho(t)$ のマスター方程式 (30) は数値積分可能になることを示す。

一般的に方程式 (30) は、右辺の 2 次の項において記憶項 $\rho(t-u)$ があるため、数値的にも解くことができない。 $\rho(t-u)$ を $\rho(t)$ で置き換えマルコフ化しても、系が多体系の時は事実上数値積分は不可能である。ところが、前節において導入した 2 点関数を用いれば数値積分が可能になる。それを示すためには (30) において記憶項、

$$f(t) = h(0) \cdot \int_0^t du g(u) e^{-iH_S u} \rho(t-u) \sigma^z e^{iH_S u},$$

が漸化式の形に求められることを示せば十分である。 $g(t)$ を

$$g(t) \equiv \frac{h(t)}{h(0)},$$

と定義すると $f(t)$ は差分近似で

$$f(t) = h(0) \cdot \sum_{n=0}^{\frac{t}{\Delta t}} g(n\Delta t) e^{-iH_S \cdot (n\Delta t)} \rho(t - n\Delta t) \sigma^z e^{iH_S \cdot (n\Delta t)} \cdot \Delta t.$$

と表すことができる。この時、次の時間ステップでの $f(t + \Delta t)$ は $f(t)$ を用いて次のように表わすことができる。

$$\begin{aligned}
 f(t + \Delta t) &= h(0) \cdot \sum_{n=0}^{\frac{t}{\Delta t}+1} g(n\Delta t) e^{-iH_S \cdot (n\Delta t)} \rho(t - (n-1)\Delta t) \sigma^z e^{iH_S \cdot (n\Delta t)} \cdot \Delta t \\
 &= h(0) \cdot \rho(t + \Delta t) \sigma^z \cdot \Delta t \\
 &\quad + h(0) \cdot g(\Delta t) e^{-iH_S \cdot \Delta t} \left\{ \sum_{n=0}^{\frac{t}{\Delta t}} g(n\Delta t) e^{-iH_S \cdot (n\Delta t)} \rho(t - n\Delta t) \sigma^z e^{iH_S \cdot (n\Delta t)} \right\} e^{iH_S \cdot \Delta t} \Delta t \\
 &= h(0) \cdot \rho(t + \Delta t) \sigma^z \cdot \Delta t + g(\Delta t) \cdot e^{-iH_S \cdot \Delta t} f(t) e^{iH_S \cdot \Delta t}, \tag{33}
 \end{aligned}$$

ここで任意の時間 t_1, t_2 に対して成り立つ関係 $g(t_1 + t_2) = g(t_1) \cdot g(t_2)$ を用いた。こうして、 $\rho(t)$ は数値的に求めることが可能になった。

3.4.4 近似の妥当性

3.4.2 節ではその形状から近似関数 (31) を導入したが、更にここではこの近似が形状だけでなく、2 点関数の数学的な側面からも妥当であることを示す。 $h(u)$ が 2 点関数であるための必要条件は、次のように表わされる。

$$h(-u) = h^*(u) \tag{34}$$

$$\hat{h}(\omega) = e^{\beta\omega} \hat{h}(-\omega), \tag{35}$$

ここで $\hat{h}(\omega)$ は $h(t)$ の Fourier 変換:

$$\hat{h}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} h(u) e^{-i\omega u} du.$$

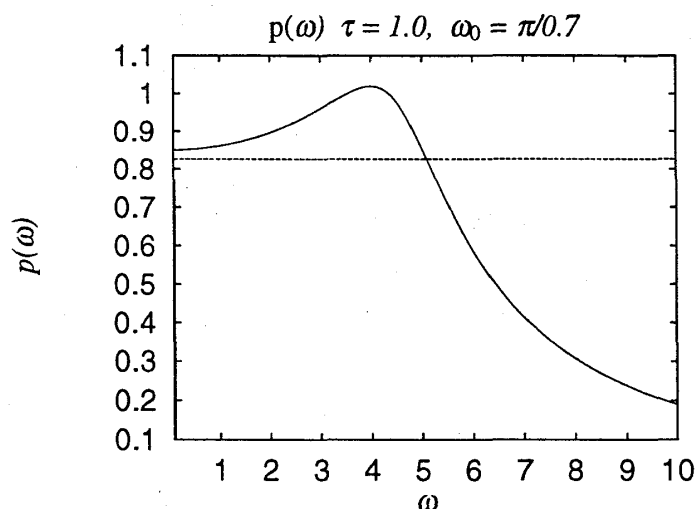
である。最初の式 (34) から $\hat{h}(\omega)$ が実数であることが分かる。この条件は (31) に対しては成立する。2 番目の式 (35) は、KMS 条件 $h(-t) = h(t + i\beta)$ を Fourier 成分で表わしたものである。近似関数 (31) がどの程度この条件を満たしているかを調べるために次のような関数を定義しよう。

$$p(\omega) = \frac{1}{\omega} \ln \left\{ \frac{\hat{h}(\omega)}{\hat{h}(-\omega)} \right\}. \tag{36}$$

この関数は、もし KMS 条件 (35) を満たすならすべての ω に対して一定値 β になるべき関数である。したがって、(31) に対してこの関数を計算することによって、それが KMS 条件をどれだけ満たしているかが分かるであろう。近似関数 (31) に対する $p(\omega)$ は次のようになる。

$$p(\omega) = \frac{1}{\omega} \ln \left\{ \frac{(\frac{1}{\tau})^2 + (\omega_0 + \omega)^2}{(\frac{1}{\tau})^2 + (\omega_0 - \omega)^2} \right\}. \tag{37}$$

この関数の典型的な図は次の Fig.3.4.2 のような図である。

Fig.3.4.2 : (31) に対する $p(\omega)$ ($\tau = 1.0, \omega_0 = \pi/0.7$)

点線は実際に $N = 5$ の非可積分系の左端にこの近似関数を使って熱浴を付け、数値計算して得た定常状態の系の逆温度であり、実線が $p(\omega)$ の曲線である。この図を見ると、 $p(\omega)$ は小さな ω に対しては定数とみなすことができるだろう。したがって、(31) は大きな時間スケールでは正しいということが言える。また大きな時間スケールで正しいという傾向から、熱浴の逆温度 β を、 ω_0 と τ を使って次のようにおおよそ見積もれるだろう。

$$\begin{aligned}\beta &\simeq \lim_{\omega \rightarrow 0} p(\omega) \\ &= \frac{4\omega_0}{(\frac{1}{\tau})^2 + \omega_0^2}\end{aligned}\quad (38)$$

これを確かめるために様々な (τ, ω_0) に対して、(38) で得られる値と実際に数値計算によって得られる定常状態の系の温度を比較してみると次の表のようになる。この結果は式 (38) がいい近似表式であることを示している。ここで数値計算は $N = 5$ の非可積分系に対して行った。

τ	ω_0	$\frac{4\omega_0}{(\frac{1}{\tau})^2 + \omega_0^2}$	β by simulation
1.0	$\pi/0.5$	0.621	0.4844
1.0	$\pi/0.7$	0.847	0.8255
1.5	$\pi/1.0$	1.22	1.2565
1.0	$\pi/0.3$	0.38	0.2525
2.0	$\pi/1.0$	1.24	1.3515

今度は (31) が近似関数として採用できるための条件を考えてみよう。物理的に方程式の中で散逸の役目を担っているのは $f(t)$ である。いま、 $f(t)$ の (k, n) 成分を考えよう。

$$\begin{aligned}
 f_{kn}(t) &= \sum_l \int_0^t du h(u) e^{-i\epsilon_k u} \rho_{kl}(t-u) \sigma_{ln}^z e^{i\epsilon_n u} \\
 &= \sum_l \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^t du \hat{h}(\omega) e^{i\{\omega - (\epsilon_k - \epsilon_n)\}u} \rho_{kl}(t-u) \sigma_{ln}^z \\
 &\sim h(0) \sum_l \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^t du \left\{ \frac{\frac{2}{\tau}}{(\frac{1}{\tau})^2 + (\omega - \omega_0)^2} \right\} e^{i\{\omega - (\epsilon_k - \epsilon_n)\}u} \rho_{kl}(t-u) \sigma_{ln}^z \quad (39)
 \end{aligned}$$

ここで最後は、 $h(u)$ に対して (31) を用いた。 $\rho_{kl}(t-u)$ は $h(u)$ の緩和時間が早いので定数とみなせる。そのために積分項で u 依存があるのは $e^{i\{\omega - (\epsilon_k - \epsilon_n)\}u}$ の項だけとなる。したがって大きな寄与は条件 $\omega - (\epsilon_k - \epsilon_n) \simeq 0$ をみたす ω の領域のみとなる。こうして、緩和の本質的なメカニズムは共鳴であり、その共鳴は Energy 差が ω_0 の場所で起こり、半値幅は $\frac{1}{\tau}$ と見積もれることが分かった。したがって近似 (31) を採用するためには $p(\omega)$ がそれらの共鳴領域においてほぼ定数になっている必要がある。共鳴条件付近で $p(\omega)$ がほぼ定数であれば、その領域で KMS 条件が成り立っていることになるから、系は定常状態において平衡状態に収束する (Energy 分布がカノニカル分布になる)。以上のことから条件は

$$p(\omega) \simeq \text{定数} \quad (0 \leq \omega \leq \omega_0 + \frac{1}{\tau})$$

とできる。この条件を満たすとき (31) を用いて数値計算をし、定常状態での系の Energy 分布を求めてみよう。Fig.3.4.3 にその Energy 分布を示した。ここでシミュレーションは、スピン数 4 の非可積分系の左端に $(\tau, \omega_0) = (1.0, \pi/0.7)$ の熱浴を付けておこなった。 $(1.0, \pi/0.7)$ は温度 1.2 にあたる。点線は定常状態から逆算した温度に対するカノニカル分布を表わしており、点は系の Hamiltonian H_S を対角化させるようなユニタリー変換を最終状態の密度行列 $\rho(t)$ を施したときの対角成分を表わしている。実際にこのユニタリー変換が密度行列を対角化することは確認した。この 2 つのデータは非常に良く一致しており、系が最終的に統計力学的平衡状態に落ちたということを表わしている。また、今は系の左端に熱浴を付けたのであるが、両端に同じ熱浴を付けても系は同じ平衡状態に収束することも確認した。

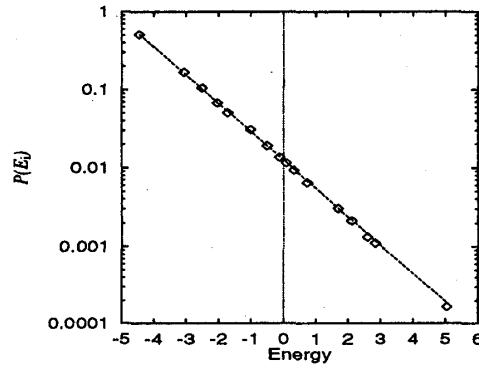


Fig.3.4.3: $N = 4, \tau = 1.0, \omega_0 = \pi/0.7$ に対する Energy 分布

3.5 熱伝導

この節では熱伝導のシミュレーションを行なう。具体的には、両端に異なる温度の熱浴を付け、定常状態の温度の空間分布と熱流の値を求める。我々は、ワークステーションで現実的にシミュレーションすることができる最大のスピン数 $N = 7$ に対し相互作用の強さ $\lambda = 0.20$ で熱浴を付ける。数値計算の方法は、時間幅 0.005 の 4 次の Runge-Kutta 法を用い、熱浴のパラメータとしては、左端には温度 0.7 にあたる $(\tau, \omega_0) = (2.0, \pi/1.0)$ が、右端には温度 2.0 にあたる $(\tau, \omega_0) = (1.0, \pi/0.5)$ を用いた。 i 番目の部分系の温度は、その場所の定常エネルギーと、次のように求められる温度に対するエネルギー期待値 $\langle \epsilon_i(\beta) \rangle$ を比べることによって求める。

$$\langle \epsilon_i(\beta) \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ H_{ss}(i) e^{-\beta H'_s} \right\}}{\text{Tr} e^{-\beta H'_s}}$$

$$H'_s = H_s + \lambda (\langle \sigma_1^z \rangle_1 \sigma_1^z + \langle \sigma_N^z \rangle_N \sigma_N^z), \quad (40)$$

ここで β は逆温度である。 $\lambda (\langle \sigma_1^z \rangle_1 \sigma_1^z + \langle \sigma_N^z \rangle_N \sigma_N^z)$ は系の端の効果を考慮に入れるために H_s に加えた。このようにして部分系の温度を求めると、最終状態の系の温度分布は Fig.3.5.1、Fig.3.5.2 のようになる。この図を見ると、可積分系では温度分布が flat になり、非可積分系では有限な温度勾配が現れていることが分かる。また、古典系における FPU 格子の場合のように熱浴と系において温度の大きなとびが観測される。両端は奇妙な振る舞いを見せており、全体の温度領域が低温側にずれているが、これらの明確な理由は分からない。なお、熱流は可積分系では 0.0015 であり、非可積分系では 0.001 であった。そのため、非可積分系での熱伝導係数は約 0.2 と計算される。

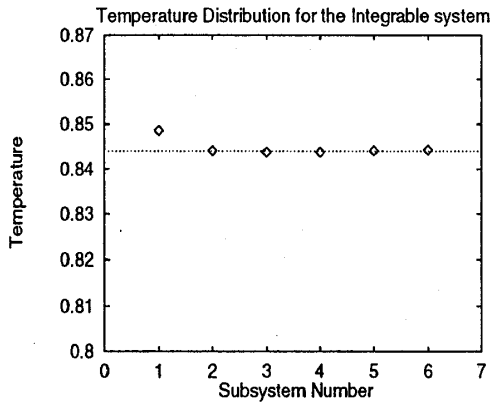


Fig.3.5.1 : 可積分系に対する温度分布

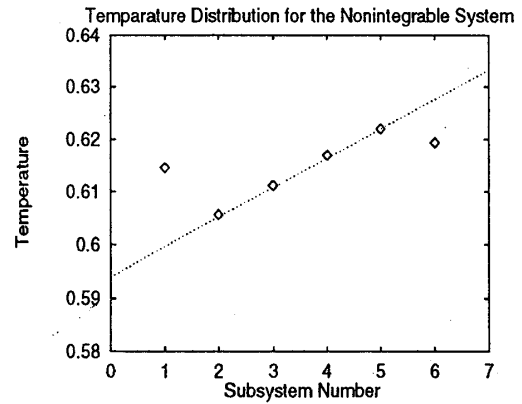


Fig.3.5.2 : 非可積分系に対する温度分布

3.6 まとめと議論

我々は量子スピン系を用いて熱伝導を議論し、可積分系が古典系の完全調和格子に相当する flat な温度分布を示し、非可積分系は FPU 格子に相当する有限な温度勾配を持つことを示すことができた [24]。特に後者では線形な温度分布を示し、Fourier の法則が成立しているための必要条件を満たしていることが分かる。更にこの系が Fourier の法則を満たすことを示すには、熱流のサイズ N 依存性を見なければならない。それゆえ、更に大きなサイズの数値実験を可能にするための方法を考えねばならない。

もし、Fourier の法則が満たされるならば、Green-Kubo 公式 [27, 13] が成り立つかどうかも確かめておかねばならない。この公式は、局所平衡を仮定して導出される式であるから、この式を確かめることは同時に局所平衡が成り立っていることを証明することにもなっている。この公式の明確な成立条件は未だに整理されていないが、系に保存量が多い場合は相関関数の積分が発散してしまい成立しないことが経験的に知られている。今までのところ、この公式が成立を確認している力学系は、連成振動子系に自由粒子を挟んだ Ding-a-Ling モデル [11]、それを改良した Ding-Dong モデル [13]、それとセル・オートマトン (CA) [10] であり、これらはいずれも強いカオス系であることが分かっている。

このように考えると、量子系において‘複雑さ’の度合いとはどのように測られるのかという問題意識が起こる。この点は非常に難しい点であり活発な議論が展開されている。経験的に知られている方法は、Energy Level の Spacing spectrum を見ることである。これは、実際に 1.2 節で調べたものである。経験的に、相当する古典系がカオスであるようなときは、このスペクトルが Wigner 分布になる。我々が用いた非可積分系ではこの Wigner 分布を示したわけであるから、この流れでは非可積分系の温度分布が Fourier の法則を支持するような結果になったことは自然である。これからは、Brody 分布など、非可積分性を定量的に測る分布を用いて、系統的に非可積分性と温度分布の間の関係を調べ必要があるだろう。

前節の図を見ると、古典系の様々な数値実験と同様両端に温度のとびが観測された [16]。Fourier の法則が満たされる CA のモデルでは、この温度のとびはサイズが大きくなるとサイズの逆数に比例して減少する傾向を持つ [26]。量子系でもこのような傾向が存在するかどうかは、非常に興味あるところである。

また、この研究で得られた系の温度領域が全体的に低温側にずれている理由も今後の課題である。この結果は一部には、我々が用いた熱浴が、KMS 条件を満たした正しい熱浴ではないということに起因することかもしれない。古典系の完全調和格子においては内部温度は両端で接続された熱浴の温度のちょうど中間になる。したがってこの点は、古典的な連成振動子系の結果と違うところである。しかしながら、CA に対しては内部温度が熱浴の温度の中間にならない例も発見されている。したがって、熱浴の表現のまずさ以外にも原因が存在する可能性は十分にある。この点に関しては、我々が行った量子スピン系に相当する古典系に対して同じような熱伝導の実験をして、その時内部温度が低温側にずれるかどうかを調べるところから始めるべきであろう。

最後に我々は、熱浴の方程式 (30) を数値計算する方法について言及したい。我々の方法は、2 点関数は正確に KMS 条件を満たさない (3.4.4 節)。そのために系が達する平衡状態

の温度は、正確には分からない。今回のような温度分布の形状を見るだけならこれでもよいが、定量的な議論をするときには、熱浴の不完全さからくる支障が起こる可能性がある。したがって KMS 条件を完全に満たすような数値解法はないかという自然な疑問がわく。これは非常に難しい問題ではあるが、重要な興味深い問題であり、将来の課題である。

4 まとめ

我々は 1.2 節で説明した 1 次元量子スピン系をもちいて、量子系の可積分系と非可積分系の平衡状態と非平衡状態の性質を議論してきた。2 章では可積分系と非可積分系が平衡状態では、定性的にはまったく同じ性質を示すことを示した。これは非常に意義深いことである。何故かという、このことは平衡状態における定性的なことは、非可積分な系を可積分な系で置き換えることによって十分であるということの意味しているからである。例えば、固体の比熱の問題で Debye 理論というものがある。そこでは現実には非可積分な系であるはずの固体を、可積分系である完全調和格子で置き換えるということをしている。その結果 Einstein 理論では説明できない低温の比熱を導くことに成功したのである。これは、平衡状態では両者の系に定性的な違いはないという性質を使った顕著な例である。3 章では、非平衡状態の問題として熱的拡散の問題を議論した。そこで我々は、系に数値的に熱浴を付ける手法を開発し、可積分系と非積分系では異なる温度勾配を示すことを示すことができた。特に非可積分系では、Fourier の法則を支持する有限な勾配を持つことを見出し、両者の関係が古典系における完全調和格子と FPU 格子の関係に相当することを示すことができた。非平衡状態では、位相空間での強い混合性の有無で巨視的な系の性質がまったく変わってくる。そのため、平衡状態と違って非可積分系と可積分系とで定性的性質が異なったものとなる。しかしながら、この研究では有限勾配が形成されるための明確な条件とかメカニズムまでは議論できなかった。我々のこの研究は熱伝導のメカニズムの解明に取り組むための第 1 段階でしかなく、それはこれからの大きな課題として残されている。

謝辞

この論文の著者は、宮下教授（大阪大学 理学部）、武末助教授（京都大学総合人間学部）、佐野博士（京都大学 総合人間学部）の各先生方からいただいた多数の有益な助言や議論に厚く感謝したい。宮下教授には熱浴の問題に関して、多数の論文紹介や議論をしていただいた。また武末助教授には、本研究の熱伝導の問題を提起していただき、研究を進めていく上で御自身が進めておられる CA を使った熱伝導の研究との比較から、非常に有益な助言をいただいた。佐野博士には、Spacing spectrum などの立場から熱伝導を議論をしていただいた。また論文を作る上で、物性グループの院生の方々からの作成上の助言や激励は、円滑に論文を作成する上で大変有益であった。ここに、加えて感謝の意を表わしたい。

本研究では行列を対角化する際、東京工業大学の西森秀稔教授 作成の TITPACK Ver.2 を使わせていただき、またその際の計算の一部は東京大学物性研究所大型計算機を使わせていただいたことを感謝の気持ちを持って付記する。

最後に元の修士論文を邦訳する際に原稿に目を通して下さった武末助教授に感謝したい。

参考文献

- [1] T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb, *Rev. Mod. Phys.* **36** 856 (1964).
- [2] M. L. Mehta, *Random matrices and the statistical theory of energy levels*, Academic Press (1967).
- [3] O. Bohigas and M. J. Giannoni, *Caotic Motion and Random Matrix Theories*, *Lecture Notes in Physics*, Springer - Verlag **209**, 1-99 (1984).
- [4] P. van Ede van der Pals and P. Gaspard, *Phys. Rev. Lett.* **49** 79 (1994).
- [5] A. J. Lichtenberg and M. A. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics* (Springer - Verlag, 1992).
- [6] R. V. Jensen and R. Shankar, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1879 (1985).
- [7] S. Takesue *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2499 (1987).
- [8] J. L. Lebowitz and H. Spohn, *J. Stat. Phys.* **19** 633 (1978).
- [9] H. Kaburaki and M. Machida, *Phys. Lett. A* **181** 85 (1993).
- [10] S. Takesue, *Phys. Rev. Lett.* **64** 252 (1990)
- [11] G. Casati, J. Ford, F. Vivaldi, and W. M. Visscher, *Phys. Rev. Lett.* **52** 1861 (1984)
- [12] U. Zürcher and P. Talkner, *Phys. Rev. A* **42**, 3278 (1990)
- [13] T. Prosen and M. Robnik, *J. Phys. A* **25** 3449 (1992)
- [14] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, *J. Math. Phys.* **8** 1073 (1967).
- [15] K. Ishii and H. Matsuda, *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **45** 56 (1970).
- [16] E. A. Jackson, *Nonlinearity and Irreversibility in Lattice Dynamics*, *Rocky Mountain J. Math.* **8** 127 (1978).
- [17] R. P. Feynman and F. L. Vernon, *Ann. Phys* **24** 118 (1963)
- [18] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Ann. Phys. (USA)* **149** 374 (1983)
- [19] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Physica A* **121** 587 (1983)

- [20] W. H. Louisell, Quantum Statistical properties of Radiation, Wiley, NY, (1973).
- [21] F. Haake, Quantum Statistics in Optics and Solid-State Physics, Springer - Verlag, Berlin, (1973).
- [22] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, Statistical Physics II, Springer - Verlag, Berlin (1985).
- [23] K. Saito, S. Takesue, and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Japan, **65** 1243 (1996).
- [24] K. Saito, S. Takesue, and S. Miyashita, Phys. Rev. E, to be published
- [25] K. Saito, S. Miyashita and S. Takesue, preprint
- [26] S. Takesue, Private Communication
- [27] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan **12** 570 (1957)
- [28] T. A. Brody, Lett. Nuovo Cim. **7** 482 (1973)
- [29] F. Shibata and T. Arimitsu, J. Phys. Soc. Japan, **49** 891 (1980)
- [30] S. Chaturvedi and F. Shibata, Z. Phys. **B35** 297 (1979)

Appendix A

ここでは方程式 (29) を導出する。簡単のために相互作用の Hamiltonian のように表わされるものとしよう。

$$\begin{aligned} H_T &= H_S + H_R + \lambda \cdot H_{\text{Int}} \\ H_{\text{Int}} &= A \cdot \phi, \end{aligned} \tag{41}$$

ここで ϕ 系の演算子 A と相互作用している熱浴の演算子である。 $\rho^{(I)}$ を相互作用描像の密度演算子、 $\rho^{(S)}$ を Schrödinger 描像での密度演算子とする。

$$\rho^{(I)}(t) = e^{iH_0 t} \rho^{(S)}(t) e^{-iH_0 t} \tag{42}$$

いま、 H_0 は

$$H_0 = H_R + H_S$$

である。この時 $\rho^{(I)}(t)$ の運動方程式は次のように表わされる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho^{(I)}}{\partial t} &= -i\lambda \cdot [H_{\text{Int}}(t), \rho^{(I)}(t)] \\ &\equiv \lambda \mathcal{L}(t) \cdot \rho^{(I)}. \end{aligned} \tag{43}$$

つぎに、系への縮約密度演算子を導入すると、

$$\begin{aligned}\rho_S^{(I)}(t) &= \text{Tr}_R \rho^{(I)}(t) \\ \rho_S^{(S)}(t) &= \text{Tr}_R \rho^{(S)}(t),\end{aligned}\quad (44)$$

となる。ここで、 Tr_R 熱浴の空間にたいするトレースである。 ρ の下付きの添え字 'S' は系の密度演算子であることを表わしている。初期条件を次のように、系と熱浴で decouple された形とる。

$$\begin{aligned}\rho(0) &= \rho_R(0) \cdot \rho_S(0) \\ \rho_R(0) &= \frac{e^{-\beta H_R}}{\text{Tr} \{e^{-\beta H_R}\}}.\end{aligned}\quad (45)$$

射影演算子を

$$\begin{aligned}\mathcal{P} &= \rho_R(0) \text{Tr}_R \\ \mathcal{Q} &= 1 - \mathcal{P}.\end{aligned}\quad (46)$$

のように定義すると $\rho^{(I)}$ の時間発展方程式は形式的に以下のように表わされる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{P} \rho^{(I)}(t)}{\partial t} &= \lambda \mathcal{P} \mathcal{L}(t) \mathcal{P} \rho^{(I)}(t) + \lambda \mathcal{P} \mathcal{L}(t) \mathcal{Q} \rho^{(I)}(t) \\ \frac{\partial \mathcal{Q} \rho^{(I)}(t)}{\partial t} &= \lambda \mathcal{Q} \mathcal{L}(t) \mathcal{Q} \rho^{(I)}(t) + \lambda \mathcal{Q} \mathcal{L}(t) \mathcal{P} \rho^{(I)}(t).\end{aligned}\quad (47)$$

$$\mathcal{Q} \rho^{(I)}(t) = \lambda \int_0^t \exp \left\{ \lambda \mathcal{Q} \int_s^t \mathcal{L}(u) du \right\} \mathcal{Q} \mathcal{L}(s) \mathcal{P} \rho^{(I)}(s) ds \quad (48)$$

だから $\mathcal{P} \rho^{(I)}(t)$ に対して形式的に閉じた方程式を作ると、 $(= \rho_R(0) \cdot \rho_S^{(I)}(t))$,

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{P} \rho^{(I)}(t)}{\partial t} &= \mathcal{P} \mathcal{L}(t) \mathcal{P} \rho^{(I)}(t) \\ &\quad + \lambda^2 \int_0^t \mathcal{P} \mathcal{L}(t) \exp \left\{ \lambda \mathcal{Q} \int_s^t \mathcal{L}(u) du \right\} \mathcal{Q} \mathcal{L}(s) \mathcal{P} \rho^{(I)}(s) ds\end{aligned}\quad (49)$$

$$\begin{aligned}\rho_R(0) \frac{\partial \rho_S^{(I)}(t)}{\partial t} &= -i \lambda \rho_R(0) \cdot \langle \phi \rangle_R [A(t), \rho_S^{(I)}(t)] \\ &\quad + \lambda^2 \int_0^t \mathcal{P} \mathcal{L}(t) \exp \left\{ \lambda \mathcal{Q} \int_s^t \mathcal{L}(u) du \right\} \mathcal{Q} \mathcal{L}(s) \mathcal{P} \rho^{(I)}(s) ds,\end{aligned}\quad (50)$$

$$\begin{aligned}\langle \phi \rangle_R &= \frac{\text{Tr} \{e^{-\beta H_R} \phi\}}{Z} \\ A(t) &= e^{i H_S t} A e^{-i H_S t}.\end{aligned}$$

このようにして、系の密度演算子が表現される。更にこれを Schrödinger 描像に戻してから、 λ に対しベキ展開し、 $A \cdot \phi$ を $\sigma_1^z \sigma_1^z + \sigma_N^z \sigma_N^z$ でおきかえると (29) が得られる。

Appendix B

ここでは TC 方程式、TCL 方程式の説明をする [29]。Appendix A で得られた (49) 式に基づいて説明する。

(i) Time Convolution (TC) 方程式

TC 方程式は非マルコフ方程式 (49) 式そのものである。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}\rho^{(I)}(t)}{\partial t} &= \mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{P}\rho^{(I)}(t) \\ &+ \lambda^2 \int_0^t \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \exp\left\{\lambda \mathcal{Q} \int_s^t \mathcal{L}(u) du\right\} \mathcal{Q}\mathcal{L}(s)\mathcal{P}\rho^{(I)}(s) ds \end{aligned} \quad (51)$$

いま任意の演算子 X に対して

$$\langle X \rangle \equiv \mathcal{P}X \quad (52)$$

と定義すると、積分項は以下のようにベキ展開される。

$$\begin{aligned} \text{積分項} &= \int_0^t \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \exp\left\{\lambda \mathcal{Q} \int_s^t \mathcal{L}(u) du\right\} \mathcal{Q}\mathcal{L}(s)\mathcal{P}\rho^{(I)}(s) ds \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \int_0^t ds \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \cdots \int_s^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2) \cdots \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_n) \mathcal{Q}\mathcal{L}(s) \mathcal{P}\rho(s) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \int_0^t ds \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \cdots \int_s^{t_{n-1}} dt_n \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \cdots \mathcal{L}(t_n) \mathcal{L}(s) \rangle_{P.C} \langle \rho(s) \rangle \end{aligned} \quad (53)$$

ここで $\langle \dots \rangle_{P.C}$ は partial cumulant とよばれ

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \cdots \mathcal{L}(t_n) \mathcal{L}(s) \rangle_{P.C} &= \sum' (-1)^{q-1} \prod \langle \mathcal{L}(t) \cdots \mathcal{L}(t_l) \rangle \langle \mathcal{L}(t_{l+1}) \cdots \rangle \\ &\quad \cdots \langle \mathcal{L}(t_m) \rangle \langle \mathcal{L}(t_{m+1}) \cdots \mathcal{L}(s) \rangle \quad t_l > t_m \end{aligned}$$

で定義される。和は t の順番を変えないという条件のもとで、すべての分割に対してとられ、 q は分割の数である。例えば

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_2) \rangle_{P.C} &= \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_2) \rangle - \langle \mathcal{L}(t) \rangle \langle \mathcal{L}(t_2) \rangle \\ \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \mathcal{L}(t_2) \rangle_{P.C} &= \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \mathcal{L}(t_2) \rangle - \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \rangle \langle \mathcal{L}(t_2) \rangle \\ &\quad - \langle \mathcal{L}(t) \rangle \langle \mathcal{L}(t_1) \mathcal{L}(t_2) \rangle + \langle \mathcal{L}(t) \rangle \langle \mathcal{L}(t_1) \rangle \langle \mathcal{L}(t_2) \rangle \end{aligned}$$

となる。

(i) Time Convolutionless (TCL) 方程式

TCL 方程式は (51) 式を変形しマルコフ化したものである。そのために、まず $\mathcal{Q}\rho^{(I)}(t)$ に対する式 (48) を考える。

$$\mathcal{Q}\rho^{(I)}(t) = \lambda \int_0^t \exp\left\{\lambda \mathcal{Q} \int_s^t \mathcal{L}(u) du\right\} \mathcal{Q}\mathcal{L}(s)\mathcal{P}\rho^{(I)}(s) ds$$

$$\begin{aligned}
 &= \lambda \int_0^t \exp \left\{ \lambda \mathcal{Q} \int_s^t \mathcal{L}(u) du \right\} \mathcal{Q} \mathcal{L}(s) \mathcal{P} \exp \left\{ \lambda \mathcal{Q} \int_t^s \mathcal{L}(u) du \right\} ds (\mathcal{P} + \mathcal{Q}) \rho^{(1)}(t) \\
 &= \hat{\zeta}(t) (\mathcal{P} + \mathcal{Q}) \rho^{(1)}(t).
 \end{aligned} \tag{54}$$

ここに $\hat{\zeta}(t)$ は

$$\hat{\zeta}(t) = \lambda \int_0^t \exp \left\{ \lambda \mathcal{Q} \int_s^t \mathcal{L}(u) du \right\} \mathcal{Q} \mathcal{L}(s) \mathcal{P} \exp \left\{ \lambda \mathcal{Q} \int_t^s \mathcal{L}(u) du \right\},$$

である。したがって、 $\mathcal{Q} \rho^{(1)}(t)$ は

$$\mathcal{Q} \rho^{(1)}(t) = \frac{\hat{\zeta}(t)}{1 - \hat{\zeta}(t)} \mathcal{P} \rho^{(1)}(t), \tag{55}$$

と表すことができる。これを、(47) の $\mathcal{P} \rho^{(1)}(t)$ に対する方程式に代入すると、

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{P} \rho^{(1)}(t)}{\partial t} &= \lambda \mathcal{P} \mathcal{L}(t) \mathcal{P} \rho^{(1)}(t) + \lambda \mathcal{P} \mathcal{L}(t) \frac{\hat{\zeta}(t)}{1 - \hat{\zeta}(t)} \mathcal{P} \rho^{(1)}(t) \\
 &= \frac{\lambda \mathcal{P} \mathcal{L}(t)}{1 - \hat{\zeta}} \mathcal{P} \rho^{(1)}(t),
 \end{aligned} \tag{56}$$

が得られる。このようにして TCL 方程式が得られた。 $\frac{\lambda \mathcal{P} \mathcal{L}(t)}{1 - \hat{\zeta}}$ は次のようにベキ展開できることが知られている [30]。

$$\frac{\lambda \mathcal{P} \mathcal{L}(t)}{1 - \hat{\zeta}} = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \int_0^t ds \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \cdots \int_s^{t_{n-2}} dt_{n-1} \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \cdots \mathcal{L}(t_{n-1}) \rangle_{O.C} \tag{57}$$

ここに、 $\langle \dots \rangle_{O.C}$ は Ordered cumulant とよばれ、

$$\langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \cdots \mathcal{L}(t_{n-1}) \rangle_{O.C} = \sum'' (-1)^{q-1} \prod \langle \mathcal{L}(t) \cdots \mathcal{L}(t_i) \rangle \langle \mathcal{L}(t_j) \cdots \mathcal{L}(t_l) \rangle \langle \mathcal{L}(t_m) \cdots \rangle \cdots$$

$$(t > \cdots > t_i, t_j > \cdots > t_l, t_m > \cdots) \tag{58}$$

と表される。この時、和は $t > \cdots > t_i, t_j > \cdots > t_l, t_m > \cdots$ のように各分割内で時間が大きい順序になるという条件のもとですべての分割に対してとられる（ただし $\mathcal{L}(t)$ は常に左端におかれる）。 q は分割の数である。例えば

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \rangle_{O.C} &= \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \rangle - \langle \mathcal{L}(t) \rangle \langle \mathcal{L}(t_1) \rangle \\
 \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \mathcal{L}(t_2) \rangle_{O.C} &= \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \mathcal{L}(t_2) \rangle - \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_1) \rangle \langle \mathcal{L}(t_2) \rangle \\
 &\quad - \langle \mathcal{L}(t) \mathcal{L}(t_2) \rangle \langle \mathcal{L}(t_1) \rangle - \langle \mathcal{L}(t) \rangle \langle \mathcal{L}(t_1) \mathcal{L}(t_2) \rangle \\
 &\quad + \langle \mathcal{L}(t) \rangle \langle \mathcal{L}(t_1) \rangle \langle \mathcal{L}(t_2) \rangle + \langle \mathcal{L}(t) \rangle \langle \mathcal{L}(t_2) \rangle \langle \mathcal{L}(t_1) \rangle
 \end{aligned}$$

である。

以上のように TC, TCL 方程式が得られたわけであるが、これらは見た目は違っても全く同値な方程式である。しかし λ に対する展開係数が違うため、有限のベキで方程式を近似する時は、物理的対象によって使い分けられる。